现代物理基础丛书



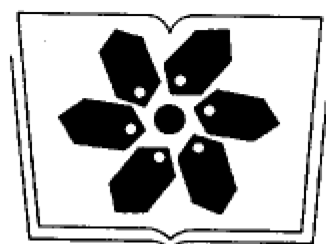
物理学中的群论

（第二版）

马中骐 著



科学出版社
www.sciencep.com



中国科学院科学出版基金资助出版

现代物理基础丛书　8

物理学中的群论

(第二版)

马中骐　著

科学出版社

北　京

内 容 简 介

本书与第一版相比在教学体系上做了重大调整. 基础内容包括群的基本概念、群的线性表示理论、转动群、晶体对称性和李群与李代数基本知识等, 适合物理专业各类学生的群论教学需要, 也适合理论化学专业研究生参考. 进一步的内容(带星号)包括正多面体对称群、置换群、杨算符和各种矩阵群的不可约张量基计算等, 适合理论物理专业研究生的群论教学需要. 附录中提供了一些供参考和查阅的内容, 与本书配套的《群论习题精解》涵盖了本书中全部习题的解答, 这些资料和表格, 有利于学生自学和年青物理学家查阅.

图书在版编目(CIP)数据

物理学中的群论/马中骐著. —2 版. —北京: 科学出版社, 2006
(现代物理基础丛书; 8)

ISBN 7-03-016755-4

Ⅰ.物… Ⅱ.马… Ⅲ.群论-应用-物理学-研究生-教材 Ⅳ.O411.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2006)第 000921 号

责任编辑: 胡 凯/责任校对: 张 琪
责任印制: 安春生/封面设计: 王 浩

科学出版社 出版
北京东黄城根北街16号
邮政编码:100717
http://www.sciencep.com
双青印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销
*
1998 年 1 月第 一 版 1998 年 1 月第一次印刷
2006 年 2 月第 二 版 开本: B5(720×1000)
2006 年 2 月第 6 次印刷 印张: 36
印数: 10 601 ~13 600 字数: 652 000

定价: 68.00 元

前　言

对称性研究在物理学各个领域都起着越来越重要的作用. 群论是研究系统对称性质的有效工具, 因此群论方法已逐渐成为物理工作者必备的基础知识. 许多物理专业或理论化学专业的研究生把群论课选作学位课或选修课.

《物理学中的群论》(第一版) 由科学出版社于 1998 年出版, 当时作为 “中国科学院研究生教学丛书” 之一, 中国科学院研究生院和不少高等院校选作物理专业研究生的群论教材或主要参考书. 短短 7 年间此书共印了五次, 总印数 10600 本. 在使用过程中, 作者收到不少教师和同学的来信来电, 除了表达对作者的鼓励外, 也提出不少中肯的意见. 意见归纳起来主要可分三个方面：一是篇幅较大, 不能适合不同情况的教学需要. 必读部分、选读部分和查阅部分混在一起没有区分, 不便作为教材使用; 二是书中有的习题偏难, 不容易找到简洁明了的计算方法, 希望能看到供参考的习题解答; 三是结合科研和教学各种情况的需要, 希望能提供一些供查阅的常用资料和表格, 以及反映近几年在物理学中所应用的群论方法的新发展. 本书就从这三方面着手, 结合作者在这几年科研和教学的新经验, 对原书做了重大的调整. 重新组织李群和李代数的教学体系, 认真选择教材以区别对待各种不同的需要, 增加一些群论方法发展的新内容, 融入科研的新成果和教学的新体会. 希望本书改写后能更适合当前的群论教学需要.

经过调研, 目前各高等院校和科研院所物理专业研究生群论课程的课时很不相同. 多的约 120 学时, 适用于理论物理专业的学生; 少的约 60 学时, 适用于物理学其他专业. 本书中不带星号的章节是必读部分, 适合 60 学时的教学需要. 如果课时多于 60 学时, 可以按学生的具体情况, 灵活选用带星号的章节, 建议首先选用第六章的内容, 其次是第八章的内容, 再其次是第九章的内容. 全部选用则适合 120 学时的教学需要. 附录部分供参考和查阅之用.

2002 年科学出版社出版了《群论习题精解》. 此书涵盖了《物理学中的群论》第一版中全部习题解答, 列出了一些供查阅的常用资料和表格, 同时增加了解题必备知识的简明介绍. 原想把这些简明介绍作为一本群论教材的简写本, 但看来还不够系统, 不能满足需要. 据反映, 此书在帮助读者解题方面起到了一定的作用. 书中列出的一些计算结果和重要结论的证明, 也有利于参考和查阅. 虽然《群论习题精解》是按照《物理学中的群论》第一版的章节安排编写的, 但还基本适合第二版的需要. 在《群论习题精解》中已经列举的一些计算结果和计算方法, 本书不再重复, 如正二十面体中一些结果的计算方法, 置换群不可约表示直乘分解的克莱布施 - 戈登级数, 若干点群和置换群群代数中的正交归一的不可约基的形式, 非紧致李群无

穷维幺正表示的研究方法举例等. 对物理专业的学生来说, 群论是一个数学工具. 要真正掌握一个数学工具, 独立地完成计算练习是必不可少的.《群论习题精解》仅供同学在做完习题后参考, 不应代替学习中必要的独立计算练习.

《物理学中的群论》第一版对第七章以后内容的编排初衷, 是希望学生在接触抽象的李群和李代数理论之前, 对物理上常见的李群 SU(N) 和 SO(N) 先有一个直观的了解, 有了具体实例更便于掌握抽象理论. 但实践证明, 在不了解李群和李代数的一般理论时, 对 SU(N) 群和 SO(N) 群的性质很难有深入的理解, 而且这样的安排在材料上难免有重复. 本书第二版在体系上做了大的调整, 先讲李群和李代数的一般理论, 再分别就 SU(N) 群、SO(N) 群和 USp(2ℓ) 群介绍不可约张量基的计算方法. 对李群和李代数的一般理论, 希望读者把注意力更多投向表示理论, 即计算李代数表示的方块权图方法和计算表示直乘的克莱布施 – 戈登级数的主权图方法.

方块权图方法和主权图方法没有涉及表示空间状态基的波函数性质, 而这些波函数在物理应用中又十分重要. 在波函数的计算方面, 作者这几年有了新的体会, 发展了新的方法. 把波函数的计算放在李群和李代数一般理论的后面讲, 可以讲得更深入更透彻. 对 SO(N) 群来说, 这些状态基的物理意义就是角动量本征函数, 在物理中十分重要. 以前因为计算中所涉及的无迹张量, 很难明显表达出它们的解析形式, 所以很少见到讨论. 作者在把三维空间的广义球谐多项式方法推广到高维空间时, 找到了克服这一困难的方法. 本书从群论角度介绍了高维空间量子三体系统独立的角动量本征函数基的计算方法, 在附录中还详细推导了高维狄拉克方程的径向方程.

对《物理学中的群论》第一版中的其他章节, 再版时在材料选取和教学方法上也做了认真斟酌, 保留了第一版的特点, 提高了教材的可读性, 希望适合各种层面的教学需要. 新版能否达到预期的效果, 还有待实践的检验. 作者诚恳欢迎读者的宝贵意见和批评建议.

本书编写过程中作者得到国家自然科学基金的资助.

马中骐

2005 年于北京

符 号 说 明

符号	说明
$\boldsymbol{a}$	矢量, 三维空间矢量用 $\vec{a}$.
$\hat{\boldsymbol{n}}$, $\boldsymbol{e}_\mu$	单位矢量.
$\underline{a}$	列矩阵.
Γ	对角矩阵.
$D(R)^{-1}$, $D(R)^T$	矩阵 $D(R)$ 的逆和转置.
$D(R)^*$, $D(R)^\dagger$	矩阵 $D(R)$ 的复共轭和转置共轭.
$\mathcal{L}$, $\mathcal{L}_1$	线性空间或子空间.
$\mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2$	两线性空间之和.
$\mathcal{L}_1 \oplus \mathcal{L}_2$	两线性空间之直和.
AB	数的乘积, 矩阵的乘积或张量, 旋量的直乘.
$\times$	矩阵的直乘, 表示的直乘, 置换群表示的内积.
$\otimes$	两群的直乘, 置换群表示的外积, 杨图的外积.
R, S 等	算符, 变换, 群元素.
$\mathcal{R}$	集合, 复元素.
$\mathcal{C}_\alpha$	类.
$n(\alpha)$	类中元素的数目.
W_α	类中元素之和, 类算符.
g_c	群中包含的类的数目.
$\omega = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi/3}$, $\eta = \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi/5}$	常用参数.
$\rho = 0, 1, 2, \cdots, (n-1), \bmod n$	ρ 取整数, 相差 n 的取值认为相等.
$G' \approx G$	群 G' 和群 G 同构.
$G' \sim G$	群 G' 和群 G 同态.
$D(G) \simeq \overline{D}(G)$	表示 $D(G)$ 和表示 $\overline{D}(G)$ 等价.
$T_a,\ a = 1,\ 2,\ 3$	三维转动群自身表示的生成元.
$T_{ab}^{(r)},\ 1 \leqslant a \leqslant N,\ r = 1,\ 2,\ 3,$	SU(N) 群自身表示的生成元.
$T_{ab},\ 1 \leqslant a \leqslant N$	SO(N) 群自身表示的生成元.
I_a, I_A, $D(I_A)$	李群表示的生成元.
$C^{jk}_{\mu\nu,JMr}$, $\langle j,\mu,k,\nu \vert J,(r),M\rangle$ 或 $\langle \boldsymbol{M}_1,\boldsymbol{m}_1;\boldsymbol{M}_2,\boldsymbol{m}_2 \vert \boldsymbol{M},(r),\boldsymbol{m}\rangle$	克莱布施 – 戈登系数, 无重表示时 r 可省略.
$\vert j,\mu\rangle \vert k,\nu\rangle$, $\vert\mu\rangle\vert\nu\rangle$, $\vert\boldsymbol{m}_1\rangle\vert\boldsymbol{m}_2\rangle$ 或 $\vert\boldsymbol{M}_1,\boldsymbol{m}_1\rangle\vert\boldsymbol{M}_2,\boldsymbol{m}_2\rangle$	相似变换前的状态基.

符号	说明
$\vert\vert J,(r),M\rangle$ 或 $\vert\vert \boldsymbol{M},(r),\boldsymbol{m}\rangle$	相似变换后的状态基, 无重表示时 r 可省略.
$C_{jk}^{\ \ \ell}$, $C_{AB}^{\ \ \ D}$	李群的结构常数.
$\vec{V}(x)=\sum_a \vec{e}_a\boldsymbol{V}(x)_a=\sum_a \vec{e'}_a V(x)_a$	矢量在定坐标系 K 的分量为 $\boldsymbol{V}(x)_a$, 在动坐标系 K' 中的分量为 $V(x)_a$.
$\Psi^j_\mu(x)_\rho$	ρ 是旋量的分量指标, j 和 μ 表此函数基属 SO(3) 群不可约表示 D^j μ 行.
P_R, $O_R=P_RQ_R$	标量、张量和旋量函数变换算符.
P 和 Q	横向置换和纵向置换.
P_0 和 Q_0	横向对换和纵向对换.
r, t, y_μ	置换的线性组合.
$\mathcal{Y}$, $\mathcal{P}$, $\mathcal{Q}$	杨算符、横算符、纵算符.
$\mathcal{T}$, $\mathcal{T}^*$	协变和逆变张量空间.
$[\lambda]$	杨图或置换群表示.
$\mathcal{L}$, $\mathcal{L}_R$	李代数和实李代数.
$\mathcal{H}$	半单李代数的嘉当子代数.
H_j 和 E_α	半单李代数的正则基.
H_μ, E_μ 和 F_μ	半单李代数的谢瓦莱基.
$\boldsymbol{r}_\mu$	素根.
$\boldsymbol{w}_\mu$	基本主权.
$[\lambda]$	SU(N) 群, SO(N) 群和 USp(2ℓ) 群的张量表示.
$[(S)\lambda]$	SO(N) 群自对偶表示.
$[(A)\lambda]$	SO(N) 群反自对偶表示.
$[s]$	SO(N) 群或 SO($2\ell+1$) 群基本旋量表示.
$[\pm s]$	SO(2ℓ) 群不可约基本旋量表示.
$[s(\lambda)]$, $[\pm s(\lambda)]$	SO(N) 群高阶旋量表示.
Δ	单纯李代数全部根的集合.
Δ_+	单纯李代数全部正根的集合.

目　　录

第一章　线性代数复习

群论的主要数学工具是线性代数. 要学好群论, 必须非常熟悉线性代数中的基本概念和运算方法. 虽然我们假定读者已学习过线性代数, 但根据作者的教学经验, 由于读者在过去的学习中所用符号不同, 练习不够, 甚至接受了某些糊涂概念, 有时会给群论学习造成一些不必要的困难. 因此, 在本书之初, 我们先紧密结合物理学, 复习线性代数中的一些基本概念和运算方法, 统一符号, 强调某些容易混淆的概念. 我们愿意提醒读者, 理解这些概念和运算方法, 并不等于能熟练使用它们, 而能熟练使用本章复习的线性代数方法, 必将对以后的群论学习产生很大的帮助.

1.1　线性空间和矢量基

设系统的哈密顿量为 $H(x)$, 它的本征值 E 称为能级或能量. 若 E 是 m 重简并的, 则能找到 m 个线性无关的本征函数 $\psi_\mu(x)$, 满足

$$H(x)\psi_\mu(x) = E\psi_\mu(x) \ , \qquad \mu = 1,\ 2,\ \cdots,\ m \tag{1.1}$$

其中, x 代表系统所有自由度的坐标. $\psi_\mu(x)$ 的任何线性组合

$$\phi(x) = \sum_{\mu=1}^{m} \ \psi_\mu(x) a_\mu \tag{1.2}$$

仍是 $H(x)$ 的同一本征值的本征函数. 反之, $H(x)$ 的本征值为 E 的本征函数都能表成 $\psi_\mu(x)$ 的线性组合形式 (1.2). $\phi(x)$ 的集合构成 m 维函数空间, 或称线性空间, $\phi(x)$ 称为该空间的矢量; $\psi_\mu(x)$ 称为该空间的函数基, 或称矢量基. 式 (1.2) 中的 a_μ 称为矢量 $\phi(x)$ 在矢量基 $\psi_\mu(x)$ 中的分量.

在线性空间中, 两矢量相加 (减), 则它们的对应分量相加 (减); 矢量和数相乘, 则所有分量都乘此数; 矢量为零必须所有分量都为零. 矢量的这些运算满足线性关系

$$c\left(\sum_{\mu=1}^{m} \ \psi_\mu(x) a_\mu + \sum_{\mu=1}^{m} \ \psi_\mu(x) b_\mu\right) = \sum_{\mu=1}^{m} \ \psi_\mu(x)\left(c a_\mu + c b_\mu\right) \tag{1.3}$$

把这些概念抽象出来, 就形成线性空间和矢量的概念. 对于给定的 m 个客体 $\boldsymbol{e}_\mu$, 定

义它们的加法和与数的乘法, 满足如下线性运算关系

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{e}_\mu a_\mu + \boldsymbol{e}_\nu a_\nu = \boldsymbol{e}_\nu a_\nu + \boldsymbol{e}_\mu a_\mu \ , \\ &c\left(\sum_\mu \ \boldsymbol{e}_\mu a_\mu + \sum_\mu \ \boldsymbol{e}_\mu b_\mu\right) = \sum_\mu \ \boldsymbol{e}_\mu \left(c a_\mu + c b_\mu\right) \end{aligned} \tag{1.4}$$

其中, c, a_μ, a_ν 和 b_μ 都是常数. 要求在此线性运算中, 这 m 个客体 $\boldsymbol{e}_\mu$ 是线性无关的, 即不存在 m 个不同时为零的数 c_μ 使下式成立

$$\sum_{\mu=1}^{m} \ \boldsymbol{e}_\mu c_\mu = 0 \tag{1.5}$$

这样的 m 个客体 $\boldsymbol{e}_\mu$ 称为矢量基, 矢量基的复线性组合 $\boldsymbol{a}$ 称为矢量

$$\boldsymbol{a} = \sum_{\mu=1}^{m} \ \boldsymbol{e}_\mu a_\mu \tag{1.6}$$

a_μ 称为矢量 $\boldsymbol{a}$ 的第 μ 个分量. 所有这样的矢量的集合构成 m 维线性空间, 记作 $\mathcal{L}$. 如果限制所有分量 a_μ 都是实数, 则此线性空间称为实线性空间. 在线性空间中, 两矢量相等必须 m 个分量全部对应相等, 两矢量相加 (减) 则所有对应分量相加 (减), 数与矢量相乘则该数与矢量的每个分量分别相乘, 所有分量为零的矢量称为零矢量. 在数学上, 线性空间和矢量的概念, 是与作为矢量基的客体的具体物理内容无关的.

从式 (1.6) 可知, 在给定的线性空间和给定的矢量基中, 矢量 $\boldsymbol{a}$ 与一组有序数 $(a_1, a_2, \cdots, a_m)$ 存在一一对应的关系, 这组有序数有 m 个分量, 它们作为一个整体完全描写了这个矢量. 通常把这组有序数排成 m 行一列的列矩阵形式

$$\underline{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} \tag{1.7}$$

矢量基给定后, 列矩阵与矢量有一一对应的关系, 它是矢量的一种描写方式. 在不会引起混淆时, 常把矢量和列矩阵用同一符号描写.

矢量基也是一个矢量, 它只有一个分量不为 0 而等于 1, 即

$$\left(\boldsymbol{e}_\mu\right)_\nu = \delta_{\mu\nu} = \begin{cases} 1, & 当 \ \ \mu = \nu \\ 0, & 当 \ \ \mu \neq \nu \end{cases} \tag{1.8}$$

其中, $\delta_{\mu\nu}$ 称为克罗内克 (Kronecker)δ 函数.

如果存在 n 个不全为零的常数 c_i, 使 n 个矢量 $\boldsymbol{a}^{(1)}, \boldsymbol{a}^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{a}^{(n)}$, 满足线性关系

$$\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{a}^{(i)} c_i = 0 \tag{1.9}$$

则称此 n 个矢量线性相关. 反之, 如果不存在这样 n 个不同时为零的常数 c_i 使式 (1.9) 成立, 则称此 n 个矢量线性无关. 注意, 式 (1.9) 是一个矢量等式, 它包含 m 个分量等式. m 维线性空间中, 线性无关的矢量数目不能大于 m. 矢量基是线性无关的, 任何 m 个线性无关的矢量都可以作为一组矢量基.

在 $\mathcal{L}$ 中, n 个线性无关矢量的所有线性组合, 构成一个 n 维线性空间, 称为线性空间 $\mathcal{L}$ 的子空间 $\mathcal{L}_1$, 也称由 n 个矢量生成的 n 维空间. 只包含零矢量的子空间称为零空间. 零空间和全空间是任何线性空间都包含的两个平庸的子空间, 通常只讨论非平庸的子空间.

两个子空间 $\mathcal{L}_1$ 和 $\mathcal{L}_2$ 的所有矢量及其线性组合的集合称为两个子空间的和, 也称并 (union), 记作 $\mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2$. 这两个子空间的公共矢量的集合称为两个子空间的交 (intersection), 记作 $\mathcal{L}_1 \cap \mathcal{L}_2$.

$\mathcal{L}$ 称为两个子空间 $\mathcal{L}_1$ 和 $\mathcal{L}_2$ 的直和的充要条件是 $\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2$, 且下面等价的三个条件之一成立:

(1) $\mathcal{L}_1$ 和 $\mathcal{L}_2$ 的交是零空间.

(2) $\mathcal{L}$ 的维数等于 $\mathcal{L}_1$ 和 $\mathcal{L}_2$ 的维数之和.

(3) $\mathcal{L}$ 中任一矢量都可唯一地分解为分属 $\mathcal{L}_1$ 和 $\mathcal{L}_2$ 的矢量之和.

直和记作 $\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 \oplus \mathcal{L}_2$, 其中 $\mathcal{L}_1$ 和 $\mathcal{L}_2$ 称为互补 (complement) 的子空间. 与 $\mathcal{L}_1$ 相补的子空间不是唯一的. 直和的概念可以推广到多于两个子空间的情况, $\mathcal{L}$ 可以分解为若干个子空间的直和.

1.2 线性变换和线性算符

所谓变换就是给出一种规则, 每一个函数都能按此规则变成一个确定的新函数. 算符是描写变换的一种数学符号. 满足下述线性关系的算符 $R(x)$ 称为线性算符.

$$R(x)\left[c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x)\right] = c_1 R(x)\phi_1(x) + c_2 R(x)\phi_2(x) \tag{1.10}$$

其中, c_1 和 c_2 是常系数. 线性算符描写的变换称线性变换. 量子力学中物理量用线性算符来描写, 它作用在波函数上, 将波函数按一定的线性规则变成一个新函数. 本书如无特殊声明, 算符都指线性算符. 线性算符与矩阵有密切关系. 在群论中矩阵的概念用得非常广泛, 这里先简单介绍一下矩阵的基本概念.

把 mn 个数 $X_{\mu\nu}$ 排列成一个长方形, 称为 $m\times n$ 矩阵 X, 简称矩阵

$$X=\begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & \cdots & X_{1n} \\ X_{21} & X_{22} & \cdots & X_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ X_{m1} & X_{m2} & \cdots & X_{mn} \end{pmatrix} \tag{1.11}$$

μ 和 ν 分别称为 X 的行指标和列指标, $X_{\mu\nu}$ 称为 X 的第 μ 行第 ν 列矩阵元素, 简称矩阵元素, $X_{\mu\mu}$ 称为 X 的对角元素. X 的列数 n 为 1 时, X 称为列矩阵, 而行数 m 为 1 时称为行矩阵. 当 $m=n$ 时 X 称为 m 维方矩阵, 或简称 m 维矩阵. X 中若干行和列的矩阵元素构成的小矩阵称为 X 的子矩阵. m 维矩阵 X 的对角元素之和称为 X 的矩阵迹, 用符号 $\mathrm{Tr}\, X$ 表示. m 维矩阵 X 的行列式定义为

$$\begin{aligned} \det X &= \sum_{\mu_1\mu_2\cdots\mu_m} \epsilon_{\mu_1\mu_2\cdots\mu_m} X_{1\mu_1} X_{2\mu_2}\cdots X_{m\mu_m}\ , \\ \epsilon_{\nu_1\nu_2\cdots\nu_m}\det X &= \sum_{\mu_1\mu_2\cdots\mu_m} \epsilon_{\mu_1\mu_2\cdots\mu_m} X_{\nu_1\mu_1} X_{\nu_2\mu_2}\cdots X_{\nu_m\mu_m} \end{aligned} \tag{1.12}$$

其中, $\epsilon_{\mu_1\mu_2\cdots\mu_m}$ 称为 m 阶单位完全反对称张量, 简称 m 阶完全反对称张量. 它具有如下性质: 任何一对下标对换, 它改符号, 下标有重数时它为零, 且

$$\epsilon_{12\cdots m}=1 \tag{1.13}$$

两个 m 阶完全反对称张量相乘, 其中有 $m-n$ 个指标相重并求和, 则得

$$\begin{aligned} &\frac{1}{(m-n)!}\sum_{a_{n+1}\cdots a_m} \epsilon_{a_1\cdots a_n a_{n+1}\cdots a_m}\epsilon_{b_1\cdots b_n a_{n+1}\cdots a_m} \\ &\quad =\sum_{p_1\cdots p_n} \epsilon_{p_1\cdots p_n}\delta_{a_1 b_{p_1}}\delta_{a_2 b_{p_2}}\cdots\delta_{a_n b_{p_n}} \end{aligned} \tag{1.14}$$

其中, $\epsilon_{p_1\cdots p_n}$ 是 n 阶完全反对称张量. 例如

$$\sum_d \epsilon_{abd}\epsilon_{rsd}=\delta_{ar}\delta_{bs}-\delta_{as}\delta_{br}$$

以后我们会经常用到这一完全反对称张量.

所有矩阵元素都为零的矩阵称为零矩阵. 只有对角元素不为零的矩阵称为对角矩阵, 对角元素都相等的对角矩阵称为常数矩阵, 常数为 1 的常数矩阵称为单位矩阵, 记作 **1**. 只有当矩阵 X 的列数等于矩阵 Y 的行数时, X 才能与 Y 相乘. 一个 $m\times k$ 矩阵 X 和一个 $k\times n$ 矩阵 Y 相乘, 得到一个 $m\times n$ 矩阵, 它的矩阵元素为

$$(XY)_{\mu\nu}=\sum_{\rho=1}^{k} X_{\mu\rho}Y_{\rho\nu} \tag{1.15}$$

一般说来, 矩阵乘积次序不能交换, 也称两矩阵不能对易, 记作

$$[X,\ Y] \equiv XY - YX \neq 0\ , \qquad XY \neq YX \tag{1.16}$$

两个矩阵相乘, XY 称为乘积矩阵, X 称为左乘矩阵, Y 为右乘矩阵, 通常说, 把 X 左乘到 Y 上, 或把 Y 右乘到 X 上. 若两方矩阵乘积为单位矩阵, 则此两矩阵互称逆矩阵

$$YX = \mathbf{1}, \qquad Y = X^{-1}, \qquad X = Y^{-1} \tag{1.17}$$

方矩阵存在逆矩阵的充要条件是它的行列式不为零. 这样的矩阵称为非奇矩阵. 矩阵 X 的行列式不为零的子方矩阵的最大维数称为 X 的秩, m 维非奇矩阵的秩为 m. m 维空间任一组矢量基, 作为列矩阵排列成的 m 维方矩阵必是非奇矩阵. 如果把 m 维空间的 n 个矢量, 作为列矩阵排列成一个 $m \times n$ 矩阵, 则此 n 个矢量线性无关的充要条件是此矩阵的秩为 n.

把矩阵行列交换, 所得矩阵称为转置矩阵. 矩阵元素全取复共轭, 所得矩阵为复共轭矩阵. 矩阵取转置和复共轭, 所得矩阵为共轭矩阵

$$\left(X^T\right)_{\mu\nu} = X_{\nu\mu}\ , \qquad \left(X^*\right)_{\mu\nu} = X^*_{\mu\nu}\ , \qquad \left(X^\dagger\right)_{\mu\nu} = X^*_{\nu\mu} \tag{1.18}$$

与对角矩阵 Γ 对易的矩阵 X, $X\Gamma = \Gamma X$, 有如下一些简单而重要的性质, 希望能引起读者的注意. 若 $\Gamma_{\mu\mu} \neq \Gamma_{\nu\nu}$, 则 $X_{\mu\nu} = X_{\nu\mu} = 0$; 反之, 若 $X_{\mu\nu} \neq 0$, 则 $\Gamma_{\mu\mu} = \Gamma_{\nu\nu}$. 若 Γ 的对角元都互不相等, 则 X 是对角矩阵.

现在再回来讨论线性算符. 两个线性算符的乘积仍是一个线性算符, 它对函数或矢量的作用定义为相继用两个算符分别作用. 一般说来, 算符作用的次序不能颠倒, 简称两算符不能对易. 如果算符 $R(x)$ 与哈密顿量 $H(x)$ 可以对易, 即

$$[H(x), R(x)] \equiv H(x)R(x) - R(x)H(x) = 0 \tag{1.19}$$

则 $R(x)$ 作用在 $H(x)$ 的本征函数 $\psi_\mu(x)$ 上, 仍是 $H(x)$ 同一本征值的本征函数

$$H(x)\left\{R(x)\psi_\mu(x)\right\} = R(x)\left\{H(x)\psi_\mu(x)\right\} = E\left\{R(x)\psi_\mu(x)\right\}$$

设 $H(x)$ 的本征值 E 是 m 重简并的, 它的本征函数 ψ_μ 架设一个 m 维函数空间 $\mathcal{L}$, 则 $R(x)$ 作用在这空间的任一函数上仍是这空间的一个函数, 特别是 $R(x)\psi_\mu(x)$ 可以表成函数基 ψ_ν 的线性组合

$$R(x)\psi_\mu(x) = \sum_\nu \psi_\nu(x) D_{\nu\mu}(R) \tag{1.20}$$

这样的线性空间 $\mathcal{L}$ 称为对算符 $R(x)$ 不变的空间, 而组合系数 $D_{\nu\mu}(R)$ 排列成 m 维矩阵, 称为算符 $R(x)$ 在空间 $\mathcal{L}$ 中关于基 $\psi_\mu(x)$ 的矩阵形式, 简称 $R(x)$ 的矩阵形式.

注意, $D(R)$ 依赖于 $R(x)$, 但不依赖于 x. 设 $\phi(x)$ 是关于算符 $R(x)$ 不变的空间中的一个任意函数

$$\phi(x)=\sum_{\mu=1}^{m}\ \psi_\mu(x)a_\mu,\qquad R(x)\phi(x)=\phi_1(x)=\sum_{\nu=1}^{m}\ \psi_\nu(x)b_\nu$$

则算符 $R(x)$ 对 $\phi(x)$ 的作用规则完全由矩阵 $D(R)$ 来描写, 即

$$R(x)\phi(x)=\sum_{\mu=1}^{m}\left[R(x)\psi_\mu(x)\right]a_\mu=\sum_{\nu\mu}\psi_\nu D_{\nu\mu}(R)a_\mu$$

$$b_\nu=\sum_{\mu=1}^{m}D_{\nu\mu}(R)a_\mu \tag{1.21}$$

式 (1.20) 是对矢量基求和, 求和指标是矩阵 R 的行指标, 而式 (1.21) 是对矢量分量求和, 求和指标是矩阵 R 的列指标. 选取和注意这样的求和规则对以后的计算很有帮助.

抽象到一般的线性空间, 线性算符 R 描写线性空间矢量的特定线性变换, 它满足线性关系

$$R\left\{c_1\boldsymbol{a}+c_2\boldsymbol{b}\right\}=c_1R\boldsymbol{a}+c_2R\boldsymbol{b} \tag{1.22}$$

若 R 作用在线性空间 $\mathcal{L}$ 中任一矢量上, 仍得到属于该空间的一个矢量

$$R\boldsymbol{a}=\boldsymbol{b}\in\mathcal{L}\ ,\qquad\forall\ \boldsymbol{a}\in\mathcal{L} \tag{1.23}$$

则称此线性空间 $\mathcal{L}$ 为关于算符 R 的不变空间. 在不变空间中, 对给定的矢量基, 线性算符 R 与它的矩阵形式 $D(R)$ 有一一对应关系. 如果不会引起混淆, 有时把算符和矩阵用同一符号描写. 由 R 对矢量基的作用来计算 $D(R)$ 矩阵, 用 $D(R)$ 矩阵计算 R 对不变空间中任意矢量 $\boldsymbol{a}$ 的作用

$$R\boldsymbol{e}_\mu=\sum_\nu\ \boldsymbol{e}_\nu D_{\nu\mu}(R) \tag{1.24}$$

$$\boldsymbol{b}=\sum_\nu\boldsymbol{e}_\nu b_\nu=R\boldsymbol{a}=\sum_\mu\left(R\boldsymbol{e}_\mu\right)a_\mu=\sum_{\nu\mu}\boldsymbol{e}_\nu D_{\nu\mu}(R)a_\mu$$

即

$$b_\nu=\sum_\mu D_{\nu\mu}(R)a_\mu,\qquad\underline{b}=D(R)\underline{a} \tag{1.25}$$

式 (1.24) 是一个矢量等式, 它包含 m 个分量等式, 式中对 $D(R)$ 的行指标求和. R 作用在矢量基 $\boldsymbol{e}_\mu$ 上变成线性空间的一个矢量, 式 (1.24) 描写了变换后矢量按矢量基的组合方式. 而式 (1.25) 是一个分量等式, 它给出变换前后两矢量分量之间的联

系, 式中对 $D(R)$ 的列指标求和. 因为矢量基 $\boldsymbol{e}_\mu$ 是一个特殊的矢量, 只有一个分量不为 0, 而等于 1, 即 $(\boldsymbol{e}_\mu)_\rho = \delta_{\mu\rho}$, 所以这两个式子是统一的

$$(R\boldsymbol{e}_\mu)_\rho = \sum_\lambda D_{\rho\lambda}(R)\,(\boldsymbol{e}_\mu)_\lambda = D_{\rho\mu}(R) = \sum_\nu (\boldsymbol{e}_\nu)_\rho\, D_{\nu\mu}(R) \tag{1.26}$$

若子空间 $\mathcal{L}_1$ 中的任何矢量, 经 R 作用后仍属于子空间 $\mathcal{L}_1$, 则 $\mathcal{L}_1$ 称为 $\mathcal{L}$ 中关于 R 的不变子空间. 零空间和全空间是两个平庸的不变子空间.

1.3 相似变换

在线性空间 $\mathcal{L}$ 中, 对给定的矢量基, 矢量和列矩阵有一一对应的关系, 线性算符与其矩阵形式有一一对应的关系. 这样的列矩阵和矩阵分别是矢量和线性算符在给定的矢量基中的表现形式.

在一个 m 维线性空间中, 矢量基的选择不是唯一的, 任何 m 个线性无关的矢量都可以选作一组矢量基. 矢量基的改变并不改变矢量和线性算符本身, 但改变了它们的表现形式, 即改变了对矢量和算符的描写方式. 本节将讨论在新旧两组矢量基中, 同一个矢量的两个列矩阵形式之间的关系, 同一个线性算符的两个矩阵形式之间的关系.

设 $\boldsymbol{e}'_\nu$ 是 m 个线性无关的矢量, 在原矢量基 $\boldsymbol{e}_\mu$ 中的分量为 $S_{\mu\nu}$,

$$\boldsymbol{e}'_\nu = \sum_\mu \boldsymbol{e}_\mu S_{\mu\nu}\ , \qquad \underline{e'_\nu} = \underline{S_{\cdot\nu}} \tag{1.27}$$

由于 $\boldsymbol{e}'_\nu$ 是线性无关的, 故 S 矩阵是非奇矩阵, 即行列式非零, 存在逆矩阵 S^{-1},

$$\boldsymbol{e}_\mu = \sum_\nu \boldsymbol{e}'_\nu \left(S^{-1}\right)_{\nu\mu} \tag{1.28}$$

若取 $\boldsymbol{e}'_\nu$ 为新矢量基, 则原矢量基 $\boldsymbol{e}_\mu$ 在新基 $\boldsymbol{e}'_\nu$ 中的分量为 $\left(S^{-1}\right)_{\nu\mu}$.

同一矢量 $\boldsymbol{a}$ 在两矢量基中的分量之间的联系为

$$\boldsymbol{a} = \sum_\mu \boldsymbol{e}_\mu a_\mu = \sum_{\nu\mu} \boldsymbol{e}'_\nu \left(S^{-1}\right)_{\nu\mu} a_\mu = \sum_\nu \boldsymbol{e}'_\nu a'_\nu\ ,$$

$$a'_\nu = \sum_\mu \left(S^{-1}\right)_{\nu\mu} a_\mu\ , \qquad \underline{a}' = S^{-1}\ \underline{a} \tag{1.29}$$

同一算符 R 在两矢量基中的矩阵形式之间的联系为

$$R\boldsymbol{e}'_\nu = \sum_\rho (R\boldsymbol{e}_\rho)\, S_{\rho\nu} = \sum_{\mu\rho} \boldsymbol{e}_\mu D_{\mu\rho}(R) S_{\rho\nu}\ ,$$

$$R\boldsymbol{e}'_\nu = \sum_\rho \boldsymbol{e}'_\rho \overline{D}_{\rho\nu}(R) = \sum_{\mu\rho} \boldsymbol{e}_\mu S_{\mu\rho} \overline{D}_{\rho\nu}(R)\ ,$$

$$\sum_{\rho} D_{\mu\rho}(R)S_{\rho\nu} = \sum_{\rho} S_{\mu\rho}\overline{D}_{\rho\nu}(R) , \qquad \overline{D}(R) = S^{-1}D(R)S \tag{1.30}$$

$\overline{D}(R)$ 和 $D(R)$ 的这一联系称为相似变换. 因为两矩阵 $\overline{D}(R)$ 和 $D(R)$ 是同一个算符 R 在同一个不变空间 $\mathcal{L}$ 中关于两个不同基的矩阵形式, 有的文献中把它们称为等价矩阵. 两矩阵之间的相似变换矩阵 S 不是唯一的, 设 X 可与 $D(R)$ 对易, Y 可与 $\overline{D}(R)$ 对易, 则 XS 和 SY 都满足式 (1.30) 的相似变换关系. 相似变换还有另一种常用的表达方式

$$D(R)\ \underline{S_{\cdot\nu}} = \sum_{\rho} \underline{S_{\cdot\rho}}\ \overline{D}_{\rho\nu}(R) , \qquad R\boldsymbol{e}'_{\nu} = \sum_{\rho} \boldsymbol{e}'_{\rho}\overline{D}_{\rho\nu}(R) \tag{1.31}$$

注意, $\underline{S_{\cdot\nu}}$ 正是新基在原来基中的列矩阵形式. 式 (1.31) 表明, $D(R)$ 矩阵作用在新基上, 变成新基的线性组合, 组合系数是 $\overline{D}(R)$ 的矩阵元素. 因此式 (1.31) 正是算符的矩阵形式 (1.24) 在新基中的表现. 式 (1.31) 对理解相似变换矩阵的意义十分重要. 公式 (1.27)、(1.29) 和 (1.30) 是矢量基变换中的基本关系式, 应在理解基础上牢记和熟练运用.

矢量基的变换并不改变算符对矢量的作用, 例如 $\boldsymbol{b} = R\boldsymbol{a}$, 在原基 $\boldsymbol{e}_{\mu}$ 中表现为 $\underline{b} = D(R)\ \underline{a}$, 而在新基 $\boldsymbol{e}'_{\nu}$ 中有

$$\underline{b}' = S^{-1}\ \underline{b} = S^{-1}D(R)\ \underline{a} = S^{-1}D(R)S\ \underline{a}' = \overline{D}(R)\ \underline{a}' \tag{1.32}$$

矢量基的变换也可看成算符 S 作用的结果

$$\boldsymbol{e}'_{\nu} = S\boldsymbol{e}_{\nu} = \sum_{\mu} \boldsymbol{e}_{\mu}S_{\mu\nu} \tag{1.33}$$

由式 (1.30) 知, 算符 S 在两组矢量基中的矩阵形式是相同的. 这里在符号上没有区分算符和它的矩阵形式. 如果新基只是改变原有基的排列次序, 此时相似变换也只是改变矩阵行 (和列) 的排列次序. 这是一种特殊的相似变换, 常称简单相似变换.

设子空间 $\mathcal{L}_1$ 关于线性算符 R 是不变的, $\mathcal{L}_2$ 是它的互补子空间. 把 $\mathcal{L}_1$ 和 $\mathcal{L}_2$ 中的基合起来, 作为原空间 $\mathcal{L}$ 的新矢量基. 设子空间 $\mathcal{L}_1$ 和 $\mathcal{L}_2$ 的维数分别为 n 和 $m-n$, 则矢量基变换矩阵 S 的前 n 个列矩阵属于子空间 $\mathcal{L}_1$, 后 $m-n$ 个列矩阵属 $\mathcal{L}_2$. 经 S 相似变换, 算符 R 的矩阵形式由 $D(R)$ 变成了 $\overline{D}(R)$. 既然 $\mathcal{L}_1$ 关于 R 不变, 即

$$R\boldsymbol{e}'_{\mu} = \sum_{\nu=1}^{n} \boldsymbol{e}'_{\nu}\overline{D}_{\nu\mu}(R) , \qquad 1 \leqslant \mu \leqslant n \tag{1.34}$$

可见 $\overline{D}(R)$ 的左下角为零

$$\overline{D}_{\rho\mu}(R) = 0 , \qquad \text{当}\ \mu \leqslant n < \rho$$

$$S^{-1}D(R)S = \overline{D}(R) = \begin{pmatrix} D^{(1)}(R) & M \\ 0 & D^{(2)}(R) \end{pmatrix} \tag{1.35}$$

这样的矩阵称为阶梯矩阵. 进一步, 如果 $\mathcal{L}_2$ 也对 R 保持不变, 则 $M = 0$,

$$S^{-1}D(R)S = \overline{D}(R) = \begin{pmatrix} D^{(1)}(R) & 0 \\ 0 & D^{(2)}(R) \end{pmatrix} = D^{(1)}(R) \oplus D^{(2)}(R) \tag{1.36}$$

这样的矩阵称为 $[n, (m-n)]$ 型的方块矩阵. 这种方块矩阵可简写为两个子矩阵的直和, 如上面最后一等式所示. 通常把能通过简单相似变换, 即行和列的排列次序的变换, 化成方块 (阶梯) 矩阵的矩阵也称为方块 (阶梯) 矩阵. 这些子矩阵互相交叉起来, 但它们涉及的行和列互相都不重. 这样的矩阵不容易一眼就看清楚, 判别的方法是把矩阵指标分成两类, 看涉及两类不同指标的矩阵元素是否都为零. 如果 $\mathcal{L}$ 可分解为若干个子空间的直和, 每一个子空间都对 R 保持不变, 则 R 对应的矩阵形式 $D(R)$ 可通过相似变换化为若干个子矩阵的直和形式, 这是更一般的方块矩阵. 若 Γ 是对角的非常数矩阵, $X\Gamma = \Gamma X$, 则 X 是方块矩阵.

1.4 本征矢量和矩阵对角化

在量子力学中, 由物理量算符 $R(x)$ 的本征方程

$$R(x)\psi(x) = \lambda\psi(x)$$

计算本征值 λ 和相应的本征函数 $\psi(x)$. 物理量算符的本征值是在测量该物理量时可能测得的数值, 它描写该物理量的特征, 与函数基的选择无关.

在线性代数中, 本征方程表为

$$R\boldsymbol{a} = \lambda\boldsymbol{a} \tag{1.37}$$

在关于 R 的一个 m 维不变空间 $\mathcal{L}$ 中, 取定了矢量基后, 本征方程表为矩阵形式

$$D(R)\ \underline{a} = \lambda\ \underline{a}\ , \qquad \sum_{\nu} D_{\mu\nu}(R)a_{\nu} = \lambda a_{\mu} \tag{1.38}$$

可见, 本征矢量架设关于 R 的一个一维不变子空间. 如果在 $\mathcal{L}$ 中能找到 R 的 m 个线性无关的本征矢量 $\underline{S_{\cdot\mu}}$, 分别对应本征值 λ_{μ}, 把它们取为新的矢量基 $\boldsymbol{e}'_{\mu} = \underline{S_{\cdot\mu}}$, 则 R 在此新基 $\boldsymbol{e}'_{\mu}$ 中的矩阵形式就是对角矩阵, $S^{-1}D(R)S = \Gamma$, Γ 的第 μ 个对角元就是本征值 λ_{μ}. 因此, 要想通过相似变换把矩阵 $D(R)$ 对角化, 关键要找 R 的 m 个线性无关的本征矢量.

本征方程 (1.38) 是关于 m 个变量 a_μ 的联立线性齐次方程, 方程有非零解的充要条件是变量的系数行列式为零

$$\det\left[D(R)-\lambda\mathbf{1}\right]=0 \tag{1.39}$$

式 (1.39) 称为本征值满足的久期 (secular) 方程. 久期方程在相似变换中保持不变, 因而本征值与矢量基的选择无关. 久期方程是关于本征值的 m 次代数方程, 有 m 个根, 即 m 个本征值. m 个本征值之和等于 $D(R)$ 的矩阵迹 $\mathrm{Tr}\ D(R)$, 本征值之积等于 $D(R)$ 的行列式 $\det\ D(R)$.

把本征值代入式 (1.38) 可解得相应的本征矢量. 对应不同本征值的本征矢量互相线性无关. 当久期方程有重根时, 这重根称为重本征值. 由于本征方程 (1.38) 关于本征矢量是线性齐次的, 本征矢量允许乘任意非零常数, 对应重本征值的本征矢量还允许做非奇线性组合. 如果对应每一个重本征值, 存在与重数相同的线性无关的本征矢量, 把这些本征矢量作为列矩阵排列成矩阵 S, 则矩阵 $D(R)$ 可以通过相似变换 S 对角化, 即 $S^{-1}D(R)S=\Gamma$. S 矩阵允许右乘一个可与 Γ 对易的非奇矩阵, 它既反映了本征矢量允许包含一个任意常数因子, 也反映了对应重本征值的本征矢量允许做非奇线性组合. 在寻找两组矩阵间的公共相似变换关系时, 这种不确定性起着关键作用. 通过相似变换把矩阵对角化的方法, 也可用来寻找联系两个非对角矩阵间的相似变换关系. 因为矩阵的本征值在相似变换中保持不变, 所以能通过相似变换联系起来的两矩阵的本征值必对应相等. 设它们分别通过各自的相似变换 S 和 S' 化成同一个对角矩阵, 则 $S'S^{-1}$ 正是联系它们的相似变换矩阵. 这些技术在群论计算中经常用到, 希望读者能通过习题熟悉这些技术.

当矩阵 $D(R)$ 存在重本征值时, 由式 (1.38) 至少可解得对应此本征值的一个本征矢量, 但不一定可解得和本征值重数相同数目的线性无关的本征矢量. 最简单的例子是下面矩阵有二重本征值 1, 但线性无关的本征矢量只有一个, 因而不能通过相似变换对角化

$$\begin{pmatrix} 1 & b \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad b\neq 0 \tag{1.40}$$

矩阵 X 能通过幺正相似变换对角化的充要条件是 X 和 $X^\dagger$ 可以对易 (见习题第 11 题). 物理上常见的一大类矩阵往往能满足这一条件, 如附录 1 介绍的厄米矩阵和幺正矩阵. 对它们可以找到和矩阵维数相同数目的正交归一的本征矢量. 把这些本征矢量对应的列矩阵形式, 作为矩阵的各列 $\underline{S_{.\nu}}$, 排成幺正矩阵 S, 它就是把矩阵 X 对角化的幺正相似变换矩阵, 相似变换后的对角矩阵为 Γ, 对角元正是本征值 λ_ν

$$X\ \underline{S_{.\nu}}=\lambda_\nu\ \underline{S_{.\nu}}\ , \qquad S^{-1}XS=\Gamma\ , \qquad \Gamma_{\mu\nu}=\lambda_\nu\delta_{\mu\nu} \tag{1.41}$$

1.5 矢量内积

到现在为止, 我们只讨论了矢量间的加法运算和矢量与数的乘法运算, 现在开始讨论矢量间的乘积运算. 矢量间主要有三种乘积运算, 本节讨论两矢量乘积变成数的运算, 称为矢量的内积, 或称点乘, 以后再讨论两矢量乘积变成矢量或张量的运算.

量子力学中两波函数内积定义为

$$\langle \phi(x)|\psi(x)\rangle = \int (\mathrm{d}x)\phi(x)^*\psi(x) \tag{1.42}$$

式中对连续坐标积分, 对分立坐标求和. 等式左面的形式称为狄拉克 (Dirac) 符号. 把这种内积概念抽象化, 定义线性空间两矢量的内积 $\langle \boldsymbol{a}|\boldsymbol{b}\rangle$. 两矢量的内积关于第一个矢量是反线性的, 关于第二个矢量是线性的, 交换两矢量时, 内积取复共轭, 而且非零矢量的自内积为正实数, 称为矢量的模平方

$$\begin{aligned} &\langle c_1\boldsymbol{a}_1 + c_2\boldsymbol{a}_2|\boldsymbol{b}\rangle = c_1^*\langle \boldsymbol{a}_1|\boldsymbol{b}\rangle + c_2^*\langle \boldsymbol{a}_2|\boldsymbol{b}\rangle \ , \\ &\langle \boldsymbol{a}|c_1\boldsymbol{b}_1 + c_2\boldsymbol{b}_2\rangle = c_1\langle \boldsymbol{a}|\boldsymbol{b}_1\rangle + c_2\langle \boldsymbol{a}|\boldsymbol{b}_2\rangle \ , \\ &\langle \boldsymbol{b}|\boldsymbol{a}\rangle = \langle \boldsymbol{a}|\boldsymbol{b}\rangle^* \ , \qquad \langle \boldsymbol{a}|\boldsymbol{a}\rangle = |\boldsymbol{a}|^2 > 0 \end{aligned} \tag{1.43}$$

矢量基 $\boldsymbol{e}_\mu$ 的内积一般可表为

$$\langle \boldsymbol{e}_\mu|\boldsymbol{e}_\nu\rangle = \Omega_{\mu\nu} \tag{1.44}$$

由式 (1.43), $\Omega_{\mu\nu}$ 是厄米矩阵

$$\Omega_{\nu\mu} = \Omega_{\mu\nu}^* = \left(\Omega^\dagger\right)_{\nu\mu} \tag{1.45}$$

任取 Ω 的非零本征矢量 $\boldsymbol{a} = \sum \boldsymbol{e}_\nu a_\nu \neq 0$,

$$\sum_\nu \Omega_{\mu\nu}a_\nu = \lambda a_\mu$$

则

$$\lambda\sum_\mu |a_\mu|^2 = \sum_\mu a_\mu^*\lambda a_\mu = \sum_{\mu\nu} a_\mu^*\Omega_{\mu\nu}a_\nu = \sum_{\mu\nu} a_\mu^*\langle \boldsymbol{e}_\mu|\boldsymbol{e}_\nu\rangle a_\nu = \langle \boldsymbol{a}|\boldsymbol{a}\rangle > 0 \tag{1.46}$$

因此, Ω 的本征值必须大于零, Ω 是正定的厄米矩阵. 任意两矢量的内积可用下式计算

$$\boldsymbol{a} = \sum_\mu \boldsymbol{e}_\mu a_\mu, \qquad \boldsymbol{b} = \sum_\nu \boldsymbol{e}_\nu b_\nu, \qquad \langle \boldsymbol{a}|\boldsymbol{b}\rangle = \sum_{\mu\nu} a_\mu\Omega_{\mu\nu}b_\nu \tag{1.47}$$

模为 1 的矢量称为归一化矢量. 若两矢量内积为零, 称两矢量正交, 非零正交矢量互相线性无关.

量子力学中, 常选取正交归一的函数基, 即取 $\Omega_{\mu\nu}=\delta_{\mu\nu}$

$$\langle\psi_\mu(x)|\psi_\nu(x)\rangle=\delta_{\mu\nu}\ ,\qquad \langle\boldsymbol{e}_\mu|\boldsymbol{e}_\nu\rangle=\delta_{\mu\nu} \tag{1.48}$$

从而使许多公式变得更加简洁, 以简化计算. 特别是可利用函数基 (矢量基) 的正交归一性来计算线性算符 R 的矩阵元素 $D_{\mu\nu}(R)$

$$\begin{aligned}&\int(\mathrm{d}x)\psi_\mu^*(x)R(x)\psi_\nu(x)=\sum_\rho\int(\mathrm{d}x)\psi_\mu^*(x)\psi_\rho(x)D_{\rho\nu}(R)=D_{\mu\nu}(R)\ ,\\&\langle\boldsymbol{e}_\mu|R\boldsymbol{e}_\nu\rangle=\sum_\rho\langle\boldsymbol{e}_\mu|\boldsymbol{e}_\rho\rangle D_{\rho\nu}(R)=D_{\mu\nu}(R)\end{aligned} \tag{1.49}$$

但是, 这里我们要强调问题的另一个侧面, 式 (1.49) 不是线性算符 R 的矩阵元素 $D_{\mu\nu}(R)$ 的定义, 它只是在矢量基正交归一情况下的一个计算公式. 算符的矩阵形式是由式 (1.24) 定义的, 与内积的引入无关. 如果在某些情况下, 我们采用了非正交归一的基, 例如在晶体理论中常取不正交归一的晶格基矢作为矢量基, 则以前习惯的某些与内积有关的公式必须做相应的修正, 以免产生错误. 例如, 两矢量的内积该用式 (1.47) 来计算, 而计算算符矩阵元素的普遍公式是

$$\sum_\rho\left(\Omega^{-1}\right)_{\mu\rho}\langle\boldsymbol{e}_\rho|R\boldsymbol{e}_\nu\rangle=\sum_{\rho\tau}\left(\Omega^{-1}\right)_{\mu\rho}\langle\boldsymbol{e}_\rho|\boldsymbol{e}_\tau\rangle D_{\tau\nu}(R)=D_{\mu\nu}(R) \tag{1.50}$$

矢量内积的定义不是唯一的. 另一种常用的内积定义是让内积对两个矢量都是线性的, 同时要求 Ω 是非奇对称矩阵

$$\begin{aligned}&\langle c_1\boldsymbol{a}_1+c_2\boldsymbol{a}_2|\boldsymbol{b}\rangle=c_1\langle\boldsymbol{a}_1|\boldsymbol{b}\rangle+c_2\langle\boldsymbol{a}_2|\boldsymbol{b}\rangle\ ,\\&\langle\boldsymbol{a}|c_1\boldsymbol{b}_1+c_2\boldsymbol{b}_2\rangle=c_1\langle\boldsymbol{a}|\boldsymbol{b}_1\rangle+c_2\langle\boldsymbol{a}|\boldsymbol{b}_2\rangle\ ,\\&\langle\boldsymbol{e}_\mu|\boldsymbol{e}_\nu\rangle=\Omega_{\mu\nu}=\Omega_{\nu\mu}\ ,\qquad\det\Omega\neq0\end{aligned} \tag{1.51}$$

在这种内积定义下, 矢量的自内积不一定是实数, 更不恒正. 对实矢量空间, 这种定义与前面内积定义是一致的. 还有一种内积定义是把式 (1.51) 中的 Ω 取为非奇反对称矩阵, 这种内积常称为赝内积.

在给定的矢量基中, 矢量用列矩阵描写. 要把两矢量的内积表为列矩阵的适当乘积则遇到一点麻烦, 因为在矩阵运算中, 矩阵的乘积已有明确的定义. 列矩阵的共轭矩阵或转置矩阵是行矩阵, 只有行矩阵和列矩阵相乘才会变成数

$$\underline{a}^\dagger\ \underline{b}=\sum_\mu a_\mu^*b_\mu \tag{1.52}$$

$$\underline{a}^T\ \underline{b} = \sum_{\mu} a_\mu b_\mu \tag{1.53}$$

其中, 两列矩阵 $\underline{a}$ 和 $\underline{b}$ 的维数相同. 如果把这样的列矩阵乘积与矢量内积的定义对应起来, 则式 (1.52) 对应式 (1.43), 而式 (1.53) 对应式 (1.51), 但其中有一个重要的不同, 就是按照式 (1.52) 或 (1.53) 定义的矢量内积, 矢量基自动就是正交归一的, 因为矢量基的列矩阵只有一个分量不为 0, 而为 1. 只有当矢量基正交归一时, 矢量的内积才等于列矩阵的内积, 否则对应关系要做相应的修正

$$\langle \boldsymbol{a}|\boldsymbol{b}\rangle = \underline{a}^\dagger\ \Omega\ \underline{b} \tag{1.54}$$

$$\langle \boldsymbol{a}|R\boldsymbol{b}\rangle = \sum_{\mu\nu\rho} a_\mu^* R_{\nu\rho} b_\rho \langle \boldsymbol{e}_\mu|\boldsymbol{e}_\nu\rangle = \underline{a}^\dagger\ \Omega D(R)\ \underline{b} \tag{1.55}$$

这一差别容易引起混淆, 应该特别注意.

最后, 简单介绍一下算符 R 的共轭算符 $R^\dagger$ 的概念. 共轭算符 $R^\dagger$ 的定义是与内积定义相联系的, 可以从共轭矩阵的定义中得到启发. 设 $\underline{a}$ 和 $\underline{b}$ 是两维数相同的任意列矩阵, $D(R)$ 是相同维数的方矩阵, 则共轭矩阵 $D^\dagger(R)$ 满足

$$[D(R)\underline{b}]^\dagger\ \underline{a} = \left[\underline{a}^\dagger\ D(R)\ \underline{b}\right]^* = \sum_{\mu\nu} a_\mu D_{\mu\nu}^*(R) b_\nu^* = \sum_{\nu\mu} b_\nu^* D_{\nu\mu}^\dagger(R) a_\mu = \underline{b}^\dagger\ D^\dagger(R)\ \underline{a}$$

量子力学中共轭算符的定义是此式的推广, 用狄拉克符号表达为

$$\langle R\boldsymbol{b}|\boldsymbol{a}\rangle = \langle \boldsymbol{a}|R\boldsymbol{b}\rangle^* = \langle \boldsymbol{b}|R^\dagger \boldsymbol{a}\rangle \tag{1.56}$$

算符的共轭关系是相互的. 注意, 如果矢量基不是正交归一的, 互相共轭的算符 R 和 $R^\dagger$, 在此基中的矩阵形式 $D(R)$ 和 X 不一定互为共轭矩阵

$$R\boldsymbol{e}_\mu = \sum_\rho \boldsymbol{e}_\rho D_{\rho\mu}(R)\ , \qquad R^\dagger \boldsymbol{e}_\nu = \sum_\rho \boldsymbol{e}_\rho X_{\rho\nu}$$

$$\sum_\rho D_{\rho\mu}^*(R)\langle \boldsymbol{e}_\rho|\boldsymbol{e}_\nu\rangle = \langle R\boldsymbol{e}_\mu|\boldsymbol{e}_\nu\rangle = \langle \boldsymbol{e}_\mu|R^\dagger \boldsymbol{e}_\nu\rangle = \sum_\rho \langle \boldsymbol{e}_\mu|\boldsymbol{e}_\rho\rangle X_{\rho\nu}$$

$$X = \Omega^{-1} D^\dagger(R) \Omega \tag{1.57}$$

只有当矢量基正交归一时, 互为共轭的算符才对应互相共轭的矩阵.

1.6 矩阵的直接乘积

量子系统由两个子系统组成时, 系统波函数往往表成两个子系统波函数的乘积, 或乘积的线性组合. 设两子系统的函数基分别记作 ψ_μ 和 ϕ_i, 则合成系统波函数可表成下面乘积基的线性组合

$$\psi_\mu \phi_i\ , \qquad 1 \leqslant \mu \leqslant m\ ,\ \ 1 \leqslant i \leqslant n \tag{1.58}$$

设两子系统的函数空间分别是 m 维和 n 维的, 则合成系统的函数空间是 mn 维的, 通常称为两个函数空间的直接乘积. 只要把函数空间换成一般的线性空间, 同样可以定义两个线性空间的直接乘积.

设两子空间关于线性算符 R 都是不变的, 在上述基中算符 R 的矩阵形式分别是 m 维矩阵 $D^{(1)}(R)$ 和 n 维矩阵 $D^{(2)}(R)$

$$R\psi_\mu = \sum_{\nu=1}^{m} \psi_\nu D_{\nu\mu}^{(1)}(R) , \qquad R\phi_i = \sum_{j=1}^{n} \phi_j D_{ji}^{(2)}(R) \tag{1.59}$$

则在直接乘积空间中, R 算符关于乘积基的矩阵形式是 mn 维的, 称为矩阵 $D^{(1)}(R)$ 和矩阵 $D^{(2)}(R)$ 的直接乘积, 简称直积, 记作 $D^{(1)}(R) \times D^{(2)}(R)$, 即

$$R(\psi_\mu \phi_i) = \sum_{\nu\ j} (\psi_\nu \phi_j) \left[D^{(1)}(R) \times D^{(2)}(R)\right]_{\nu j,\mu i} \tag{1.60}$$

$$\left[D^{(1)}(R) \times D^{(2)}(R)\right]_{\nu j,\mu i} = D_{\nu\mu}^{(1)}(R) D_{ji}^{(2)}(R) \tag{1.61}$$

直乘空间的基需要两个指标 μ 和 i 作为整体来共同描写. 通常选取指标的排列次序为, 第一个指标自小至大排列, 对第一个指标的每一个取值, 先把第二个指标自小至大顺序排列. 例如, 两个二维矩阵 X 和 Y 的直乘, 有

$$X \times Y = \begin{pmatrix} X_{11}Y & X_{12}Y \\ X_{21}Y & X_{22}Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_{11}Y_{11} & X_{11}Y_{12} & X_{12}Y_{11} & X_{12}Y_{12} \\ X_{11}Y_{21} & X_{11}Y_{22} & X_{12}Y_{21} & X_{12}Y_{22} \\ X_{21}Y_{11} & X_{21}Y_{12} & X_{22}Y_{11} & X_{22}Y_{12} \\ X_{21}Y_{21} & X_{21}Y_{22} & X_{22}Y_{21} & X_{22}Y_{22} \end{pmatrix} \tag{1.62}$$

若参加直乘的两矩阵中有一个是一维的, 则矩阵直乘简化为数与矩阵的乘积.

矩阵直乘有如下性质. 这些性质不难证明, 例如可先设想矩阵通过相似变换对角化, 然后做简单验证.

(1) 直乘矩阵的维数等于因子矩阵维数的乘积.

(2) $\text{Tr}\ (X \times Y) = (\text{Tr}\ X)(\text{Tr}\ Y)$.

(3) 设矩阵 X_1 和 X_2 维数相同, Y_1 和 Y_2 维数相同, 则

$$(X_1 \times Y_1)\ (X_2 \times Y_2) = (X_1 X_2 \times Y_1 Y_2) \tag{1.63}$$

$$\begin{aligned} (X \times Y)^{-1} &= X^{-1} \times Y^{-1} , \\ (X \times Y)^{T} &= X^{T} \times Y^{T} , \\ (X \times Y)^{\dagger} &= X^{\dagger} \times Y^{\dagger} \end{aligned} \tag{1.64}$$

(4) 设矩阵 X 和 Y 的维数分别为 m 和 n, 则

$$\det(X \times Y) = (\det\ X)^n (\det\ Y)^m \tag{1.65}$$

(5) 设矩阵 X 和 Y 都是连续参数 α 的函数, 则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}(X\times Y)=\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\alpha}\times Y+X\times\frac{\mathrm{d}Y}{\mathrm{d}\alpha}\ . \tag{1.66}$$

(6) $X\times Y$ 一般不等于 $Y\times X$, 但它们的差别仅在于行 (列) 排列次序不同, 即相差一个简单相似变换. 例如, 当 X 和 Y 的维数都为 2 时, 相差的相似变换为

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{1.67}$$

习　　题

1. 证明矩阵的本征值之和等于矩阵迹, 本征值之积等于矩阵行列式.
2. 找相似变换把下列矩阵对角化

$$(1)\ \begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \end{pmatrix};\qquad (2)\ \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}.$$

3. 找相似变换矩阵 M 使

$$M^{-1}\begin{pmatrix} 0 & -\cos\theta & \sin\theta\sin\varphi \\ \cos\theta & 0 & -\sin\theta\cos\varphi \\ -\sin\theta\sin\varphi & \sin\theta\cos\varphi & 0 \end{pmatrix}M=\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

4. 找相似变换矩阵 M 使

$$M^{-1}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$M^{-1}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}M = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$M^{-1}\begin{pmatrix} 0 & 0 & \mathrm{i} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\mathrm{i} & 0 & 0 \end{pmatrix}M = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

5. 设

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad Y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}$$

找相似变换矩阵 M 使

$$M^{-1}(X \times X)M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

$$M^{-1}(Y \times Y)M = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -\sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}.$$

6. 找使下面三矩阵同时对角化的公共相似变换矩阵 M

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

7. 写出既幺正又厄米的 $m \times m$ 矩阵的一般形式.

8. 若 $\det X \neq 0$, 证明 $X^\dagger X$ 和 $XX^\dagger$ 都是正定的厄米矩阵.

9. 证明: (1) 若 $X^\dagger X = \mathbf{1}$, 则 $XX^\dagger = \mathbf{1}$;

(2) 若 $X^{-1}X = \mathbf{1}$, 则 $XX^{-1} = \mathbf{1}$;

(3) 若 $X^T X = \mathbf{1}$, 则 $XX^T = \mathbf{1}$.

10. 试讨论 2×2 幺正矩阵和实正交矩阵各含有多少个独立实参数, 并写出它们的一般表达式.

11. 证明矩阵 X 能通过幺正相似变换对角化的充要条件是 X 和 $X^\dagger$ 乘积可以对易.

12. 证明任何矩阵 R 都可通过相似变换化为若尔当 (Jordan) 标准型的直和, 若尔当标准型是

$$R_{ab} = \begin{cases} \lambda, & \text{当 } a = b\,, \\ 0 \text{ 或 } 1, & \text{当 } a + 1 = b\,, \\ 0, & \text{其他}. \end{cases}$$

第二章　群的基本概念

群论是研究系统对称性质的有力工具. 在这一章里, 我们首先从系统对称性质的研究中, 概括出群的基本概念, 通过一些简单的和物理中常见的群的例子, 使读者对群有较具体的认识; 然后, 引入群的各种子集的概念, 群的同构与同态的概念, 群的直接乘积的概念. 对有限群来说, 群的全部性质都体现在群的乘法表中. 我们将介绍填写群乘法表的方法和如何由群的乘法表来分析有限群性质.

2.1　对　　称

对称是一个人们十分熟悉的用语. 世界处在既对称又不严格对称的矛盾统一之中. 房屋布局的对称给人一种舒服的感觉, 但过分的严格对称又给人死板的感觉. 科学理论的和谐美, 其中很大程度上表现为对称的美. 在现代科学研究中, 对称性的研究起着越来越重要的作用.

我们常说, 斜三角形很不对称, 等腰三角形比较对称, 正三角形对称多了, 圆比它们都更对称. 但是, 对称性的高低究竟是如何描写的呢?

对称的概念是和变换密切联系在一起的, 所谓系统的对称性就是指它对某种变换保持不变的性质. 保持系统不变的变换越多, 系统的对称性就越高. 只有恒等变换, 也就是不变的变换, 才保持斜三角形不变. 等腰三角形只对底边的垂直平分面反射保持不变, 而正三角形对三边的垂直平分面反射都保持不变, 还对通过中心垂直三角形所在平面的轴转动 $\pm 2\pi/3$ 角的变换保持不变. 圆对任一直径的垂直平分面的反射都保持不变, 也对通过圆心垂直圆所在平面的轴转动任何角度的变换保持不变. 因为保持圆不变的变换最多, 所以它的对称性最高.

量子系统的物理特征由系统的哈密顿量 (Hamiltonian) 决定, 量子系统的对称性则由保持系统哈密顿量不变的变换集合来描写. 例如, N 个粒子构成的孤立系统的哈密顿量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^{N} m_j^{-1} \nabla_j^2 + \sum_{i<j} U(|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|)$$

其中, $\boldsymbol{r}_j$ 和 m_j 是第 j 个粒子的坐标矢量和质量, ∇_j^2 是关于 $\boldsymbol{r}_j$ 的拉普拉斯 (Laplace) 算符, U 是两个粒子间的二体相互作用势, 它只是粒子距离的函数. 拉普拉斯算符是对坐标分量的二阶微商之和, 它对系统平移、转动和反演都保持不变. 作用势只依赖于粒子间的相对坐标绝对值, 它也对这些变换保持不变. 若粒子是全同粒子, 哈

密顿量还对粒子间的任意置换保持不变. 这个量子系统的对称性质就用系统对这些变换的不变性来描述.

保持系统不变的变换称为系统的对称变换, 对称变换的集合描写系统的全部对称性质. 根据系统的对称性质, 通过群论方法研究, 可以直接得到系统许多精确的、与细节无关的重要性质. 我们还没有学习群论方法, 还无法用群论方法对系统的复杂对称性质进行研究, 但为了使读者对群论方法有一个直观的了解, 下面举一个简单例子说明群论方法的基本思路.

研究一个具有空间反演对称性的量子系统. 系统哈密顿量对空间反演变换保持不变, 因而哈密顿量的本征函数 ψ 通过空间反演, 仍是哈密顿量同一本征值的本征函数. 用 P 代表在空间反演下波函数的变换算符

$$P\psi(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2,\ \cdots) = \psi(-\boldsymbol{r}_1,\ -\boldsymbol{r}_2,\ \cdots)$$

则对哈密顿量来说, ψ 和 $P\psi$ 有相同的本征值, 而且由于哈密顿量是线性算符, ψ 和 $P\psi$ 的任何线性组合仍有相同的本征值. 取如下组合

$$\begin{aligned} &\phi_S \sim \psi + P\psi\ , \qquad &&\phi_A \sim \psi - P\psi \\ &P\phi_S = \phi_S\ , &&P\phi_A = -\phi_A \end{aligned} \tag{2.1}$$

在空间反演中按式 (2.1) 变换的波函数 ϕ_S 和 ϕ_A 分别称为具有偶宇称和奇宇称的波函数. 我们看到, 不管系统的具体性质如何, 只要系统具有空间反演对称性, 它的定态波函数 (即哈密顿量本征函数) 总可组合成具有确定宇称状态的函数. 这就是说, 宇称是该系统的守恒量, 可以用宇称来对该系统的定态波函数进行分类. 进一步, 作为一级近似, 电偶极跃迁的概率与电偶极算符在初末态间的矩阵元模平方成比例, 这个矩阵元表达成初末态波函数和电偶极算符的乘积关于坐标的积分. 因为电偶极算符与坐标算符成比例, 是坐标的奇函数, 它在空间反演中改符号, 所以当初末态宇称相同时, 这个矩阵元的被积函数是坐标的奇函数, 它的空间积分为零, 也就是说, 在宇称状态相同的初末态间电偶极跃迁概率的一级近似为零. 这一性质在量子力学中称为电偶极跃迁选择定则.

这一简单例子说明, 尽管系统哈密顿量可能很复杂, 薛定谔方程难以精确求解, 但从研究系统的对称性质着手, 可以得到系统某些精确的与细节无关的重要性质 (例如, 根据对称性, 可确定系统的守恒量), 可对系统的定态波函数进行分类, 并可得出精确的跃迁选择定则.

2.2 群及其乘法表

保持系统不变的变换称为系统的对称变换, 系统的对称性质由对称变换的集合来描写. 我们先来研究系统对称变换集合的一般性质. 按照物理中的惯例, 两个变

换的乘积定义为相继做两次变换. 显然, 两个对称变换的乘积仍是系统的对称变换, 三个对称变换的乘积满足结合律. 不变的变换, 即恒等变换也是一个对称变换, 它与任何一个对称变换的乘积仍是该对称变换. 系统对称变换的逆变换也是系统的一个对称变换. 上述性质是系统对称变换集合的共同的性质, 与具体系统的具体对称性质无关. 把对称变换集合的这些共同性质归纳出来, 得到群 (group) 的定义.

定义 在规定了元素的 "乘积" 法则后, 元素的集合 G 如果满足下面四个条件, 则称为群.

(1) 集合对乘积的封闭性. 集合中任意两元素的乘积仍属此集合

$$RS \in G , \qquad \forall\, R \text{ 和 } S \in G . \tag{2.2}$$

(2) 乘积满足结合律.

$$R(ST) = (RS)T , \qquad \forall\, R,\ S \text{ 和 } T \in G . \tag{2.3}$$

(3) 集合中存在恒元 E, 用它左乘集合中的任意元素, 保持该元素不变, 即

$$E \in G, \qquad ER = R , \qquad \forall\, R \in G . \tag{2.4}$$

(4) 任何元素 R 的逆 R^{-1} 存在于集合中, 满足

$$\forall\, R \in G , \qquad \exists\, R^{-1} \in G , \qquad \text{使 } R^{-1}R = E . \tag{2.5}$$

作为数学中群的定义, 群的元素可以是任何客体, 元素的乘积也可任意规定. 一旦确定了元素的集合和元素的乘积规则, 满足上述四个条件的集合就称为群. 系统对称变换的集合, 关于变换的乘积, 满足群的四个条件因而构成群, 称为系统的对称变换群. 在物理中常见的群大多是线性变换群、线性算符群或矩阵群. 如果没有特别说明, 当元素是线性变换或线性算符时, 元素的乘积都定义为相继做两次变换; 当元素是矩阵时, 元素的乘积则取通常的矩阵乘积.

在群的定义中, 群元素是什么客体并不重要, 重要的是它们的乘积规则, 也就是它们以什么方式构成群. 如果两个群, 它们的元素之间可用某种适当给定的方式一一对应起来, 而且元素的乘积仍以此同一方式一一对应, 那么, 从群论观点看, 这两个群完全相同, 虽然它们描述的对象可以完全不同. 文献中常称这种对应关系对元素乘积保持不变. 具有这种对应关系的两个群称为同构 (isomorphism).

定义 若群 G' 和 G 的所有元素间都按某种规则存在一一对应关系, 它们的乘积也按同一规则一一对应, 则称两群同构. 用符号表示, 若 R 和 $S \in G$, R' 和 $S' \in G'$, $R' \longleftrightarrow R$, $S' \longleftrightarrow S$, 必有 $R'S' \longleftrightarrow RS$, 则 $G' \approx G$, 其中符号 "$\longleftrightarrow$" 代表一一对应, "$\approx$" 代表同构.

互相同构的群, 它们群的性质完全相同. 研究清楚一个群的性质, 也就了解了所有与它同构的群的性质. 在群同构的定义里, 元素之间的对应规则没有什么限制. 但如果选择的规则不适当, 使元素的乘积不再按此规则一一对应, 并不等于说, 这两个群就不同构. 只要对某一种对应规则, 两个群符合群同构的定义, 它们就是同构的.

从群的定义出发, 可以证明, 恒元和逆元也满足

$$RE = R\ , \qquad RR^{-1} = E \tag{2.6}$$

第二个式子表明元素与其逆元是相互的. 由此易证群中恒元是唯一的, 即若还存在元素 E', 满足 $E'R = R$, 则 $E' = E$. 群中任一元素的逆元是唯一的, 即若 $SR = E$, 则 $S = R^{-1}$. 于是, 恒元的逆元是恒元, 和 $(RS)^{-1} = S^{-1}R^{-1}$. 作为逻辑练习, 习题第 1 题让读者证明这些结论. 证明中除了群的定义外, 不能用以前熟悉的任何运算规则, 因为它们不一定适合群元素的运算. 下面我们认为这些结论已经证明, 可以应用了.

一般说来, 群元素乘积不能对易, $RS \neq SR$. 元素乘积都可以对易的群称为阿贝尔 (Abel) 群. 若群中至少有一对元素的乘积不能对易, 就称为非阿贝尔群. 元素数目有限的群称为有限群, 元素的数目 g 称为有限群的阶 (order). 元素数目无限的群称为无限群, 如果无限群的元素可用一组连续变化的参数描写, 则称为连续群.

把群的子集, 即群中部分元素的集合 $\mathcal{R} = \{R_1,\ R_2,\ \cdots,\ R_m\}$, 看作一个整体, 称为复元素. 作为集合, 复元素不考虑所包含元素的排列次序, 且重复的元素只取一次. 两复元素相等, 即 $\mathcal{R} = \mathcal{S}$ 的充要条件是它们包含的元素相同, 即 $\mathcal{R} \subset \mathcal{S}$ 和 $\mathcal{S} \subset \mathcal{R}$. 普通元素和复元素相乘仍是复元素. $T\mathcal{R}$ 是由元素 TR_j 的集合构成的复元素, 而 $\mathcal{R}T$ 则由元素 R_jT 的集合构成. 设 $\mathcal{S} = \{S_1,\ S_2,\ \cdots,\ S_n\}$, 两复元素的乘积 $\mathcal{RS}$ 是所有形如 R_jS_k 的元素集合构成的复元素. 上面出现的元素乘积, 如 TR_j, R_jT 和 R_jS_k, 均按群元素的乘积规则相乘. 复元素的乘积满足结合律. 如果复元素的集合, 按照复元素的乘积规则, 符合群的四个条件, 也可构成群.

定理一 (重排定理)　设 T 是群 $G = \{E,\ R,\ S,\ \cdots\}$ 中的任一确定元素, 则下面三个集合与原群 G 相同

$$\begin{aligned} TG &= \{T,\ TR,\ TS,\ \cdots\}\ , \\ GT &= \{T,\ RT,\ ST,\ \cdots\}\ , \\ G^{-1} &= \{E,\ R^{-1},\ S^{-1},\ \cdots\} \end{aligned}$$

用复元素符号表达为

$$TG = GT = G^{-1} = G \tag{2.7}$$

证明　以 $TG = G$ 为例证明. 集合 TG 的所有元素都是群 G 的元素, 故

$TG \subset G$. 反之, 群 G 的任意元素 R 都可表成 $R = T(T^{-1}R)$, 而 $(T^{-1}R)$ 是群 G 的元素, 故 R 属于 TG, $G \subset TG$. 证完.

对于有限群, 群元素数目有限, 我们有可能把元素的乘积全部排列出来, 构成一个表, 称为群的乘法表 (multiplication table), 简称群表. 为了确定起见, 对于 $RS = T$, 今后我们称 R 为左乘元素, S 为右乘元素, 而 T 为乘积元素. 乘法表由下法建立: 在表的最左面一列, 把全部群元素列出来, 作为左乘元素, 在表的最上面一行, 也把全部群元素列出来, 作为右乘元素, 元素的排列次序可以任意选定, 常让左乘元素和右乘元素的排列次序相同, 恒元排在第一位. 表的内容有 $g \times g$ 格, 每一格填入它所在行最左面一列的元素 R(左乘元素) 和它所在列最上面一行的元素 S(右乘元素) 的乘积 RS. 如果恒元排在表中第一个位置, 因它与任何元素相乘还是该元素, 故乘法表内容中第一行和右乘元素相同, 第一列和左乘元素相同. 由重排定理, 乘法表乘积元素中每一行 (或列) 都不会有重复元素. 乘法表完全描写了有限群的性质.

对两个阶数相同的有限群, 当把群元素分别按一定次序列在乘法表上时, 实际上已给出了它们元素之间的一种一一对应关系. 如果在此对应下, 它们的乘法表完全相同, 则此两群同构. 当然, 如果由于群元素排列次序选得不适当, 本来同构的群也可能看起来似乎有不同的乘法表. 当阶数确定后, 重排定理大大限制了互相不同构的有限群数目. 例如, 以后我们将证明, 阶数为相同素数的有限群都同构.

我们先来看二阶群和三阶群的乘法表. 当把第一列和第一行按左乘元素和右乘元素填完后, 重排定理已完全确定了表中剩余位置的填充, 如表 2.1 和表 2.2 所示.

表 2.1 二阶群的乘法表

	e	σ
e	e	σ
σ	σ	e

表 2.2 三阶群的乘法表

	e	ω	ω'
e	e	ω	ω'
ω	ω	ω'	e
ω'	ω'	e	ω

在二阶群中, 可让 e 代表恒等变换, σ 代表空间反演变换, 则此群正是对空间反演不变的系统的对称变换群, 常记作 V_2. 也可让 e 代表数 1, σ 代表数 -1, 按普通的数乘积, 它们也构成二阶群, 记作 C_2. 这两群是同构的, $\mathrm{V}_2 \approx \mathrm{C}_2$, 从群论观点看它们完全相同. 三阶群中, 可设 $e = 1$, $\omega = \exp(-\mathrm{i}2\pi/3)$ 和 $\omega' = \exp(\mathrm{i}2\pi/3)$, 按复数的乘积, 它们构成三阶群, 记作 C_3.

这两个例子有一个共同的特点, 就是群中所有元素都可由其中一个元素的幂次来表达. 二阶群中, $e = \sigma^2$; 三阶群中, $\omega' = \omega^2$, $e = \omega^3$. 推而广之, 由一个元素 R 及其幂次构成的有限群称为由 R 生成的循环群, 记作 C_n, n 是循环群的阶, R 称为循环群的生成元. n 阶循环群的一般形式是

$$\mathrm{C}_n = \{E,\ R,\ R^2,\ \cdots,\ R^{n-1}\}\ , \qquad R^n = E\ , \qquad R^{-1} = R^{n-1} \tag{2.8}$$

循环群的一个典型例子是由绕空间固定轴转动 $2\pi/N$ 角的变换 R 生成的群. 在晶体理论中, 如果 R 是晶体的对称变换, 则此轴就称为晶体的 N 次固有转动轴, 简称 N 次轴, 转动 R 称为 N 次转动. 为了区分 R 和 R^{-1}, 需要规定轴的正向, 按右手螺旋法则绕轴的正向旋转 $2\pi/N$ 角的转动称为 R. 对二次轴不必规定轴的方向, 因为 $R = R^{-1}$. 循环群中元素乘积可以对易, 因而循环群是阿贝尔群. 循环群生成元的选择不是唯一的, 例如三阶循环群中 ω 和 ω' 都可作生成元. 循环群的乘法表有共同的特点, 当表中元素按生成元的幂次排列时, 表的每一行都可由前一行向左移动一格得到, 而最左面的元素移到最右面去.

既然有限群的元素数目是有限的, 那么有限群任一元素的自乘, 当幂次足够高时必然会有重复. 由群中恒元唯一性知, 有限群任一元素的自乘若干次后必可得到恒元. 若 $R^n = E$, n 是 R 自乘得到恒元的最低幂次, 则 n 称为元素 R 的阶, R 生成的循环群称为 R 的周期. 恒元, 也只有恒元的阶为 1. 同一有限群中不同元素的阶可以不同, 不同元素的周期也可有重复或重合. 请注意不要混淆群的阶和元素的阶这两个不同的概念, 只有循环群生成元的阶才等于该群的阶.

有限群中任一元素 R 的周期构成群中一个子集. 若此子集尚未充满整个群, 则在子集外再任取群中一元素 S, 由 R 和 S 所有可能的乘积构成一个更大的子集. 若它还没有充满整个群, 则再取第三个、第四个元素加入上述乘积, 最后总能充满整个群, 即群中所有元素都可表为若干个元素的乘积. 适当选择这些元素, 使有限群中所有元素都可表为尽可能少的若干个元素的乘积, 这些元素称为有限群的生成元, 有限群生成元的数目称为有限群的秩. 由于取生成元数目尽量少, 生成元不能表成其他生成元的乘积.

现在来研究四阶群的乘法表. 如果群中有一个元素的阶数为 4, 则此群是四阶循环群 C_4, 它的乘法表如表 2.3 所示. 容易检验, 四阶群中元素的阶不能为 3, 否则它的周期构成三阶循环群, 而在乘法表中第四个元素所在行 (和列) 必定会出现重复元素. 余下的情况是, 除恒元外所有元素的阶数都是 2, 这样的四阶群乘法表如表 2.4 所示. 设 σ, τ 和 ρ 分别是空间反演、时间反演和时空全反演, 则此群称为四阶反演群 V_4. 对于给定的四阶群, 如何判断它与哪个群同构呢? 如果四阶群中有阶数大于 2 的元素, 它就与 C_4 群同构; 反之, 如果在四阶群中阶数等于 2 的元素多于一个, 它就与 V_4 群同构.

表 2.3 四阶循环群 C_4 的乘法表

	E	R	S	T
E	E	R	S	T
R	R	S	T	E
S	S	T	E	R
T	T	E	R	S

表 2.4 四阶反演群 V_4 的乘法表

	e	σ	τ	ρ
e	e	σ	τ	ρ
σ	σ	e	ρ	τ
τ	τ	ρ	e	σ
ρ	ρ	τ	σ	e

最简单的非阿贝尔群是正三角形对称群 D_3, 它由六个元素组成: 过三角形中心 O 垂直三角形所在平面的轴是三次轴, 以向上方向为轴的正向, 转动 $\pm 2\pi/3$ 角的元素分别记作 D 和 F, 恒等变换为 E, 若三角形三个顶点分别记作 A, B 和 C, 则三个轴 OA, OB 和 OC 都是二次轴, 相应转动 π 角的元素分别也记作 A, B 和 C. 三角形顶点和对称变换元素用相同的符号标记, 一般不会引起混淆. 这些转动是保持三角形在平面上的位置不变的全部变换, 因而它们构成正三角形的对称变换群. 恒元的阶为 1, 三次转动元素 D 和 F 的阶为 3, 二次转动元素 A, B 和 C 的阶为 2.

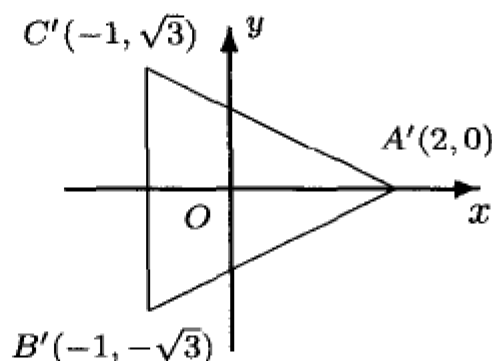


图 2.1 正三角形的坐标

建立群表的方法有很多, 下面结合 D_3 群, 介绍两种典型的方法. 在平面上建立平面直角坐标系 OXY, 画正三角形 $\Delta A'B'C'$, 中心在原点, A' 点在正 x 轴上, 三顶点的坐标 (见图 2.1) 分别为: $A'(2,0)$, $B'(-1,-\sqrt{3})$ 和 $C'(-1,\sqrt{3})$. 把同样大小的正三角形 ΔABC 放在平面上, A 和 A' 重合, B 和 B' 重合, C 和 C' 重合. 现在固定坐标平面, 用上述六种变换来变动 ΔABC, 使三个顶点 A, B 和 C 分别以不同方式与 A', B' 和 C' 点重合. 六种对称变换的结果列于表 2.5. 现在可利用表 2.5 来计算两变换的乘积. 例如, 计算变换乘积 DA, 点 A 在变换 A 中保持不变, 再经变换 D 变到点 C', 点 B 经变换 A 变到点 C', 然后把它看作新的 C 点, 经变换 D 变到点 B'. 两点已经完全确定了三角形变换后的位置, C 点经变换 DA 只能变到点 A'. 初学时不妨仍用上法计算作为检验, 即点 C 经变换 A 变到点 B', 然后把它看作新的 B 点, 经变换 D 变到点 A'. 既然 A, B 和 C 三点经变换 DA 分别变到 C', B' 和 A' 点, 从表中查出它与变换 B 的结果相同, 可见 $DA = B$. 同理可计算其他元素的乘积. 以后为方便起见, 在与表 2.5 类似的表中把撇都省略掉.

学会了计算群元素乘积的方法, 就可以来填写 D_3 群的乘法表. 因 D_3 群含六个元素, 乘法表中有 36 个位置要填写. 事实上, 我们不必用上法计算 36 次, 因为许多乘积可用更简单的方法算出来. 在表 2.6 中先把第一行和第一列填好, 它们代表恒元和群元素的乘积. 因为三次固有转动轴的三个元素 E, D 和 F 构成三阶循环群, 它们的乘法表已由表 2.2 给出, 可以先填好. 二次转动轴的元素 A, B 和 C 的阶为 2, 它们的平方是恒元 E, 这样在后三行对角线位置都填入 E. 再根据刚才的计算, $DA = B$, 把 B 填入第二行第四列, 第二行的剩余两格可以根据每行和每列元素

不重复的原则 (重排定理), 分别填以 C 和 A, 这一原则也决定了第三行后面三格的填充. 再根据 A, B 和 C 是二阶元素, 在 $DA = B$ 两边, 用 A 右乘, 然后再用 B 左乘, 算得 $D = BA$ 和 $BD = A$, 从而把 D 和 A 分别填入第五行的第四和第二列. 余下的格子都可根据重排定理, 由左向右逐列填过去. 这样, 我们只用到 D_3 群群元素的阶数和公式 $DA = B$, 就完成了乘法表的填写. 由乘法表可知, D_3 群的秩为 2, 两个生成元可取 D 和 A, 则 $F = D^2$, $E = D^3$, $B = DA$ 和 $C = AD$. 一般说来, 对阶数为 g 的群, 只需要知道群元素的阶数分布和若干对元素的乘积规则, 就可以算出全部 $g \times g$ 个乘积公式来.

表 2.5　正三角形的对称变换

	E	D	F	A	B	C
A	A'	C'	B'	A'	C'	B'
B	B'	A'	C'	C'	B'	A'
C	C'	B'	A'	B'	A'	C'

表 2.6　正三角形对称群 D_3 的乘法表

	E	D	F	A	B	C
E	E	D	F	A	B	C
D	D	F	E	B	C	A
F	F	E	D	C	A	B
A	A	C	B	E	F	D
B	B	A	C	D	E	F
C	C	B	A	F	D	E

对六阶群, 若有一个元素的阶为 6, 则此群为循环群 C_6. 由重排定理, 六阶群不能含有阶数为 4 或 5 的元素. 又如习题第 4 题让读者证明的, 除恒元外六阶群元素的阶数不能都是 2. 若六阶群中有两个元素阶数为 3, 记作 D 和 $F = D^2$, 其余元素记作 A, B 和 C, 则 A^2, B^2 和 C^2 都不能等于 D 或 F, 否则它是六阶元素. 由重排定理, D 和 F 左乘到元素 A, B 和 C 上只能取值在 A, B 或 C 之中, 于是 $A^2 = B^2 = C^2 = E$. 又从上面讨论中看到, 一旦 DA 确定下来, 整个乘法表就完全确定了, 而由重排定理 DA 只能等于 B 或 C, 由此只能构成两种乘法表. 作为一个抽象群, B 和 C 的地位是完全平等的, 只要把 B 和 C 的名字换一下, 两种情况的乘法表就完全相同. 换名字相当于给出两群元素间一种一一对应的规则, 因而这两种乘法表对应的群是同构的. 于是, 准确到同构, 六阶群只有两种: 循环群 C_6 和正三角形对称群 D_3. 对于给定的六阶群, 如何判断它与哪个群同构呢? 如果六阶群中阶数等于 2 的元素多于一个, 它就与 D_3 群同构; 反之, 如果群中存在阶数大于 3 的元素 (自乘三次还未出现恒元), 则它就与 C_6 群同构.

现在我们介绍建立群乘法表的另一种典型方法. 把正三角形的变换看成平面上点的坐标变换, 变换前的坐标记作 $(x,\ y)$, 变换后的坐标记作 $(x',\ y')$, 它们都用列矩阵表出, 而变换元素表为 2×2 矩阵

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \tag{2.9}$$

对每一个变换, 把变换前后三角形顶点的坐标代入式 (2.9), 就可定出群元素对应的

矩阵形式. 注意, A' 点的坐标有一个分量为零, 计算中要尽量多利用. 例如, 变换 D 把 A 点变到 C' 点, 把 B 点变到 A' 点, 于是有等式

$$\begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ -\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

由前式不难解得 $a = -1/2$ 和 $c = \sqrt{3}/2$, 代入后式得 $b = -\sqrt{3}/2$ 和 $d = -1/2$. 用同样方法可得六个群元素的矩阵形式如下

$$\begin{aligned} E &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & D &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}, & F &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}, \\ A &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, & B &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 1 \end{pmatrix}, & C &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.10}$$

由这六个矩阵的乘积同样可以得到乘法表 2.6. 从另一角度说, 这六个矩阵的集合, 按照矩阵乘积构成群, 式 (2.10) 给出了 D_3 群元素和六个矩阵间的一个一一对应关系, 乘法表也相同, 因而这六个矩阵构成的群和 D_3 群同构.

应用上面的方法可以研究正 N 边形对称群 D_N. 把正 N 边形放在 xy 平面上, 中心和原点重合, 一个顶点在 x 轴上. 保持正 N 边形不变的变换有两类. z 轴是 N 次固有转动轴, 绕 z 轴转动 $2\pi/N$ 角的变换记作 T, 则有 N 个对称变换 $T, T^2, \cdots, T^{N-1}$ 和 $T^N = E$. 在 xy 平面上, 当 N 是偶数时, 两相对顶点的联线和两对边中点的联线都是二次固有转动轴, 当 N 是奇数时, 顶点和对边中点的联线都是二次固有转动轴, 绕它们转动 π 角的变换都保持正 N 边形不变. 这样的二次转动轴共有 N 个, 它们与 x 轴的夹角分别为 $j\pi/N$ 角, 对应的对称变换记作 S_j, $0 \leqslant j \leqslant (N-1)$. D_N 群由此 $2N$ 个元素 T^m 和 S_j 构成. 与正三角形对称群 D_3 的符号相比, T 就是 D, 而 S_0, S_1 和 S_2 分别是 A, B 和 C.

研究 D_N 群元素的乘积规则. T 的周期是 N 阶循环群, 现在关键是要计算 TS_j 等于什么. 既然这些变换都不移动原点, 那么, 再有两点就完全确定了平面图形的位置. 设与 S_j 相应的二次轴上有点 A, 它在变换 S_j 中保持不变, 而在变换 T 中逆时针转动了 $2\pi/N$ 角, 设转到 B 点. 相应地, 原先的 B 点, 经 S_j 变到与二次轴对称的位置, 再经 T 变换, 恰好转到 A 点. 可见 TS_j 是绕 $\angle AOB$ 的角平分线转动 π 角的变换, 因为此角平分线与原二次轴夹角为 π/N, 所以

$$TS_j = S_{j+1}\ , \qquad j \mod N \tag{2.11}$$

$j \bmod N$ 是一种常用的数学符号, 它把取值相差 N 的两个 j 看作是相同的, 即 $S_{j+N} = S_j$. 式 (2.11) 是 D_3 群中公式 $DA = B$ 的推广. 注意到 S_j 的阶是 2, 由式 (2.11) 可推得群中所有元素的乘积规则

$$T^N = S_j^2 = E\ , \qquad T^m S_j = S_{m+j}\ , \qquad j \text{ 和 } m \bmod N \qquad (2.12)$$
$$T^m = S_{m+j} S_j = S_j S_{j-m}\ , \qquad S_j T^m = S_{j-m}\ ,$$

式 (2.12) 是给出有限群元素乘积规则的另一种方法, 当群的阶数较高时, 这个方法比乘法表更方便, 但阶数较低时采用乘法表更直观. 可取 D_N 群的生成元为 T 和 S_0, 而 $S_m = T^m S_0$.

2.3　群的各种子集

一、子群

群 G 的子集 H, 如果按照原来的元素乘积规则, 也满足群的四个条件, 则称为群 G 的子群 (subgroup). 注意, 乘积规则是群的最重要的性质, 如果给子集元素重新定义新的乘积规则, 那它就与原群脱离了关系, 即使此子集构成群, 也不能称为原群的子群.

既然子集元素满足原群的元素乘积规则, 结合律是显然满足的. 如果子集对元素乘积封闭, 则它必定包含子集中任一元素的周期, 对有限群来说, 元素 R 的周期包含了恒元和逆元 R^{-1}, 因此在判别有限群的子集是否构成子群时, 检验子集是否满足封闭性就够了. 当然对无限群, 判定子群还必须检验恒元和逆元是否在子集中. 不含恒元的子集肯定不是子群, 这是否定子集为子群的最简单的判据.

任何群都有两个平庸的子群, 恒元和整个群, 但通常更关心非平庸子群. 任一元素的周期构成子群, 称为循环子群 (cyclic subgroup). 循环子群和阶数相同的循环群同构, 通常就记作 C_n, 必要时用撇来加以区分. 寻找有限群的子群的最好方法就是先列出它的全部循环子群, 然后把若干循环子群并起来, 看它们是否满足封闭性. 正三角形对称群 D_3 只包含循环子群, 它们是 $\{E,\ A\}$, $\{E,\ B\}$, $\{E,\ C\}$ 和 $\{E,\ D,\ F\}$. V_4 群包含三个循环子群 $\{e,\ \sigma\}$, $\{e,\ \tau\}$ 和 $\{e,\ \rho\}$. C_6 群包含两个循环子群 $\{E,\ R^3\}$ 和 $\{E,\ R^2,\ R^4\}$. 正六边形对称群 D_6 除包含绕 z 轴转动的循环子群 C_2, C_3, C_6 和六个二次轴对应的六个循环子群 C_2 外, 还包含三个 D_2 和两个 D_3 子群, 它们的差别仅在二次轴的取向不同

$$\begin{aligned} &D_2 = \{E,\ R^3,\ S_0,\ S_3\}, \qquad D_2' = \{E,\ R^3,\ S_1,\ S_4\}, \qquad D_2'' = \{E,\ R^3,\ S_2,\ S_5\} \\ &D_3 = \{E,\ R^2,\ R^4,\ S_0,\ S_2,\ S_4\}, \qquad D_3' = \{E,\ R^2,\ R^4,\ S_1,\ S_3,\ S_5\} \end{aligned} \qquad (2.13)$$

二、陪集和不变子群

设群 G 阶为 g, 有子群 H, 阶为 h

$$H = \{S_1,\ S_2,\ S_3,\ \cdots,\ S_h\}\ , \qquad S_1 = E$$

任取群 G 中不属于子群 H 的元素 R_j, 把它左乘或右乘到子群 H 上, 得到群 G 的两个子集

$$\begin{aligned} R_jH &= \{R_j,\ R_jS_2,\ R_jS_3,\ \cdots,\ R_jS_h\}\ , \\ HR_j &= \{R_j,\ S_2R_j,\ S_3R_j,\ \cdots,\ S_hR_j\}\ , \end{aligned} \qquad R_j \in G\ , \qquad R_j \overline{\in} H \tag{2.14}$$

R_jH 称为子群 H 的左陪集 (left coset), HR_j 称为右陪集 (right coset).

陪集和子群没有公共元素. 以左陪集为例, 用反证法证明. 设 $R_jS_\mu = S_\nu$, 用 S_μ^{-1} 右乘, 得 $R_j = S_\nu S_\mu^{-1} \in H$, 与假设矛盾. 因此陪集不包含恒元, 陪集一定不是群 G 的子群.

陪集中没有重复元素, 因而陪集也包含 h 个不同的元素. 以左陪集为例, 若 $R_jS_\mu = R_jS_\nu$, 用 R_j^{-1} 左乘后必有 $S_\mu = S_\nu$.

若 H 和 R_jH 的并还没有充满整个群 G, 则再选 G 中不属于 H 和 R_jH 的元素 R_k 构造新的左陪集 R_kH. 同理可证, R_kH 也包含 h 个不同的元素, 它们都不属于 H 和 R_jH. 事实上, 两个有公共元素的左陪集必全同, 因为若 $R_jS_\mu = R_kS_\nu$, 则

$$R_k = R_j\left(S_\mu S_\nu^{-1}\right)\ , \qquad R_kH = R_j\left(S_\mu S_\nu^{-1}\right)H = R_jH$$

后式用到了重排定理. 用上法继续做下去, 群 G 一定可分解为子群 H 和若干个左陪集 R_jH 之并, 这些子集间都没有公共元素, 每个子集包含 h 个不同元素. 因此, 群 G 的阶数 g 一定是子群 H 阶数 h 的整数倍

$$G = H \cup R_2H \cup R_3H \cup \cdots \cup R_dH\ , \qquad g = dh \tag{2.15}$$

d 称为子群 H 的指数 (index), 它等于子群的左陪集数加 1. 正因为这一性质, 阶数为素数的群没有非平庸子群, 群中除恒元外元素的阶都是该素数, 因而此群一定是循环群.

群 G 中两元素 R 和 T 属同一左陪集的充要条件是 $R^{-1}T \in H$. 因为如果此条件成立, 则 $T = RS_\mu$, 而 $R = RE$, 它们同属左陪集 RH; 反之, 若 $T \in RH$, 则 $T = RS_\mu$, $R^{-1}T = S_\mu \in H$.

上述性质同样适用于右陪集. 群 G 一定可分解为子群 H 和 $(d-1)$ 个右陪集 HR_j 之并, 这些子集间都没有公共元素, 每个子集包含 h 个不同元素, 两个有公共元素的右陪集必全同, 群 G 中两元素 R 和 T 属同一右陪集的充要条件是 $TR^{-1} \in H$.

用群 G 中子群 H 外一个元素 R_j, 左乘和右乘子群 H, 得到的左陪集 R_jH 和右陪集 HR_j 不一定相同. 若子群 H 的所有左陪集都与对应的右陪集相等

$$R_jH = HR_j\ , \qquad \text{即}\ \ R_jS_\mu = S_\nu R_j \tag{2.16}$$

则此子群称为不变子群 (invariant subgroup), 或称正规子群 (normal subgroup). 注意, 此定义并不要求不变子群的元素和群 G 中所有其他元素对易. 当然, 阿贝尔群

的所有子群都是不变子群. 指数为 2 的子群必为不变子群, 因为它只有一个陪集, 左右陪集只能相等.

不变子群 H 及其所有陪集, 作为复元素的集合, 按复元素的乘积, 满足群的四个条件, 构成群, 称为群 G 关于不变子群 H 的商群 (quotient group), 记作 G/H. 商群的恒元是子群 H, 阶数是子群的指数. 在证明上述复元素的集合满足群的四个条件过程中, 用到了不变子群的定义式 (2.16)

$$\begin{aligned}&R_jHR_kH=R_jR_kHH=(R_jR_k)\,H\ ,\\&HR_jH=R_jHH=R_jH\ ,\\&R_j^{-1}HR_jH=R_j^{-1}R_jHH=H\end{aligned}$$

因此不能由一般子群及其陪集定义商群.

从群的乘法表上很容易找到子群的陪集. 事实上, 乘法表里与子群元素有关的各列中, 每一行的元素分别构成子群或左陪集, 而与子群元素有关的各行中, 每一列的元素分别构成子群或右陪集. 例如, 从表 2.6 读出, D_3 群的子群 $\{E,\ A\}$ 有两个左陪集: $\{D,\ B\}$ 和 $\{F,\ C\}$, 右陪集也有两个: $\{D,\ C\}$ 和 $\{F,\ B\}$. 左右陪集不对应相等, 因而此子群不是不变子群. 另一子群 $\{E,\ D,\ F\}$ 的指数为 2, 它是不变子群, 陪集是 $\{A,\ B,\ C\}$.

三、共轭元素和类

对群 G 中任意元素 S, 元素 $R'=SRS^{-1}$ 和 R 称为互相共轭 (conjugate) 的元素. 共轭是相互的. 与同一元素共轭的元素也相互共轭:

$$R'=SRS^{-1}\ ,\qquad R''=TRT^{-1}=\left(TS^{-1}\right)R'\left(TS^{-1}\right)^{-1}$$

所有互相共轭的元素的集合称为类 (class), 记作

$$\mathcal{C}_\alpha=\left\{R_1,\ R_2,\ \cdots,\ R_{n(\alpha)}\right\}=\left\{R_k|R_k=SR_jS^{-1},S\in G\right\}\tag{2.17}$$

$n(\alpha)$ 是类 $\mathcal{C}_\alpha$ 中所包含的元素数目, g_c 是群 G 包含的类数. 对任意给定的群 G 元素 $S\in G$, 当 R_j 取遍类中所有元素时, SR_jS^{-1} 不会有重复元素, 故有

$$S\mathcal{C}_\alpha S^{-1}=\mathcal{C}_\alpha\tag{2.18}$$

反之, 对固定的 R_j, 让 S 取遍群 G 中所有元素, SR_jS^{-1} 会有重复的元素, 而且可证 SR_jS^{-1} 等于类中每一个元素 R_k 的重复次数 $m(\alpha)$ 都相同 (见习题 13), 可见类 $\mathcal{C}_\alpha$ 中包含的元素数目 $n(\alpha)=g/m(\alpha)$ 是群 G 阶数的因子, 而此时式 (2.17) 的后一等式是在复元素的意义上成立.

显然, 恒元本身自成一类. 阿贝尔群每个元素自成一类. 两个类不会有公共元素, 因而除恒元外, 类不是子群.

类 $\mathcal{C}_\alpha$ 中元素 R_j 的逆元 R_j^{-1} 也必定互相共轭

$$R_i = SR_jS^{-1}\ , \qquad R_i^{-1} = SR_j^{-1}S^{-1}$$

逆元 R_j^{-1} 的集合也构成类, 记作 $\mathcal{C}_\alpha^{-1}$. $\mathcal{C}_\alpha$ 和 $\mathcal{C}_\alpha^{-1}$ 称为相逆 (reciprocal) 类, 它们包含的元素数目 $n(\alpha)$ 相同. 若元素与其逆元互相共轭, 则 $\mathcal{C}_\alpha$ 与其相逆类 $\mathcal{C}_\alpha^{-1}$ 重合, 这样的类称为自逆 (self reciprocal) 类.

互相共轭的元素存在某种共同的性质, 这就是互相共轭元素的集合称为类的原因. 例如, 若 $R^n = E$, 则 $(SRS^{-1})^n = SR^nS^{-1} = E$, 同类元素的阶必相同. 但阶数相同的元素不一定属于同一类. 尽管如此, 在寻找类时, 我们只需在阶数相同的元素中去判别它们是否共轭. 对有限群, 通常利用乘法表来判断两元素是否共轭. TS 和 ST 是共轭的, 因为 $(ST) = S(TS)S^{-1}$. 反之, 互相共轭的元素一定可表达成某两元素的不同次序的乘积, 因为若 $R' = S(RS^{-1})$, 则 $R = (RS^{-1})S$. 如果乘法表中取左乘元素和右乘元素的排列次序相同, 则在乘法表中关于对角线对称的两元素互相共轭, 互相共轭的元素也一定会在乘法表关于对角线对称的某位置出现.

又例如, 设群 G 是某系统 (例如晶体) 的对称变换群, 对称变换都是绕通过空间一固定点 O 的轴的转动变换. 设 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向是系统的 N 次固有转动轴, 元素 R 是绕该方向转动 $2\pi/N$ 角的变换 (这里和以后, 按照物理中常用的符号, 用加尖角的方法来强调 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 是单位矢量). 又设 $S \in G$ 把 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向转到 $\hat{\boldsymbol{m}}$ 方向. 讨论元素乘积 SRS^{-1} 的性质. S^{-1} 变换先把 $\hat{\boldsymbol{m}}$ 方向转到 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向, 然后 R 变换把系统绕 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向转动 $2\pi/N$ 角, 最后 S 变换又把 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向转回到 $\hat{\boldsymbol{m}}$ 方向. 这样, 转动 SRS^{-1} 保持 $\hat{\boldsymbol{m}}$ 方向不变, 它就是绕 $\hat{\boldsymbol{m}}$ 方向转动 $2\pi/N$ 角的变换. 因此, $\hat{\boldsymbol{m}}$ 方向也是系统的 N 次固有转动轴, 绕此两方向转动相同角度的变换互相共轭. 一般说来, 若两个同次轴的正方向可以通过对称群中的元素联系起来, 则此两转动轴称为等价轴. 等价轴一定是同次轴. 不同次的转动轴不可能通过对称群中的元素联系起来. 若一个 N 次轴的正反两个方向可以通过对称群中的元素联系起来, 即正反两个方向的 N 次轴互相等价, 则此轴称为双向轴, 或非极性轴. 二次轴没有极性的概念. 转动不同角度的元素一定不共轭. 绕等价轴转动相同角度的变换, 包括绕双向轴转动正负相同角度的变换, 互相共轭. 当两个固有转动轴次数不相同时, 绕此两轴转动的元素, 即使转动角度相同, 也一定不共轭.

由不变子群的定义式 (2.16) 知, 不变子群必须包含子群中每个元素的共轭元素, 即不变子群是由群 G 中若干个完整的类组成. 寻找群的类和不变子群是分析有限群性质的关键步骤. 对有限群, 首先根据乘法表确定每个元素的阶数, 在阶数相同元素中判断它们是否共轭, 从而找出所有的类, 然后把若干类并起来, 判断此子集是否构成子群. 若它是子群, 则它也是不变子群. 判断的方法, 首先检查此子集是否满足子群的必要条件: 子群包含恒元, 子群的元素数目是群阶数的约数, 子群完整

地包含每一元素的周期. 只有在这些条件都满足后, 才进一步利用乘法表检验子集的封闭性是否满足.

由 R 生成的循环群 C_N 是阿贝尔群, 它的每个元素都自成一类, C_N 群的类数 g_c 等于群的阶数 N. 除恒元是自逆类外, 只有当 N 是偶数时, $R^{N/2}$ 是自逆类, 其他类都不是自逆类. 当 N 是素数时, C_N 群不存在非平庸的不变子群. 若 N 可分解因子, $N = nm$, 则由 R^n 和 R^m 分别生成的循环子群 C_m 和 C_n 都是不变子群.

D_3 群中, D 和 F 的阶数是 3, A, B 和 C 的阶数是 2, 从乘法表中看到, 这些阶数相同的元素都互相共轭. 因此 D_3 群有三个类, 恒元 E 构成一类, 三次转动 D 和 F 构成一类, 二次转动 A, B 和 C 构成一类, 这三个类都是自逆类. 事实上, D_3 群中, 二次转动使三次轴成为双向轴, 三次转动使三个二次轴互相等价, 从而构成上述三类.

推广到 D_N 群, 它包含一个称为主轴的 N 次轴和垂直平面均匀分布的 N 个二次轴, N 次轴的生成元记作 T, N 个二次轴生成元分别记作 S_j, 乘法规则已由式 (2.12) 给出. 二次转动使 N 次轴成为双向轴. N 是奇数时, N 次转动使所有二次轴互相等价; N 是偶数时, N 次转动使二次轴分成两组, 分别互相等价. 因此, D_{2n+1} 群包含 $n+2$ 个自逆类

$$\{E\}, \qquad \{T^m, T^{-m}\}, \qquad \{S_0, S_1, \cdots, S_{2n+1}\}, \qquad 1 \leqslant m \leqslant n \tag{2.19}$$

D_{2n+1} 群包含的不变子群, 除了由 T 生成的循环子群 C_{2n+1} 外, 还有 C_{2n+1} 群可能包含的一些不变子群. D_{2n} 群包含 $n+3$ 个自逆类

$$\begin{aligned} &\{E\}, \qquad \{T^m, T^{-m}\}, \qquad \{T^n\}, \qquad 1 \leqslant m \leqslant n-1\ , \\ &\{S_0, S_2, \cdots, S_{2n-2}\}, \qquad \{S_1, S_3, \cdots, S_{2n-1}\} \end{aligned} \tag{2.20}$$

作为正 N 边形的对称变换, 后两个类包含的元素, 几何意义是不同的. 它们都是系统的二次转动, 但 S_{2m} 是关于相对顶点连线的转动, 而 S_{2m+1} 是关于对边中点连线的转动. D_{2n} 群包含的不变子群, 除了由 T 生成的循环子群 C_{2n} 及其可能包含的一些不变子群外, 还有两个不变子群

$$\begin{aligned} D_n &= \{E, T^2, T^4, \cdots, T^{2n-2}, S_0, S_2, \cdots, S_{2n-2}\}\ , \\ D_n' &= \{E, T^2, T^4, \cdots, T^{2n-2}, S_1, S_3, \cdots, S_{2n-1}\} \end{aligned}$$

例如, D_5 群只包含一个非平庸的不变子群

$$C_5 = \{E, T, T^2, T^3, T^4\}$$

D_6 群包含五个非平庸不变子群

$$\begin{aligned} &C_2 = \{E, T^3\}, \qquad C_3 = \{E, T^2, T^4\}, \qquad C_6 = \{E, T, T^2, T^3, T^4, T^5\}\ , \\ &D_3 = \{E, T^2, T^4, S_0, S_2, S_4\}, \qquad D_3' = \{E, T^2, T^4, S_1, S_3, S_5\} \end{aligned}$$

2.4 群的同态关系

我们已经介绍过群的同构关系. 两个同构的群, 元素之间存在一一对应的关系, 而且这种对应关系对元素乘积保持不变. 尽管这两个群可以有完全不同的物理或几何背景, 但从群论观点看, 它们的性质完全相同, 一个群完全描写了另一个群. 如果这种对应关系不是一一对应, 而是一多对应, 而且对应关系仍对群元素乘积保持不变, 那么, 这两个群不再是“全等”关系, 而变成类似“相似”关系, 称为同态 (homomorphism) 关系. 本节我们将研究群的同态关系是如何建立起来的, 群的哪些性质在同态关系中保留了下来, 哪些性质被掩盖了.

定义 若群 G' 和 G 的所有元素间都按某种规则存在一多对应关系, 即 G 中任一元素都唯一地对应 G' 中一个确定的元素, G' 中任一元素至少对应 G 中一个元素, 也可以对应 G 中若干个元素, 而且群元素的乘积也按同一规则一多对应, 则称两群同态. 用符号表示, 若 R 和 $S \in G$, R' 和 $S' \in G'$, $R' \longleftarrow R$, $S' \longleftarrow S$, 必有 $R'S' \longleftarrow RS$, 则 $G' \sim G$, 其中符号 “$\longleftarrow$” 代表一多对应, “$\sim$” 代表同态, 写在左面的群 G' 的元素一多对应于写在右面的群 G 的元素.

两个群元素间的对应关系不是唯一的. 只要在两个群元素间存在一种一多对应关系, 而且这种对应关系对群元素乘积保持不变, 这两个群就同态. 若 $G' \sim G$, 则群 G' 只反映了群 G 的部分性质, 下面定理将精确地告诉我们群 G' 反映了群 G 的哪部分性质.

定理二 若 $G' \sim G$, 则与 G' 恒元相对应的 G 中元素的集合 H 构成群 G 的不变子群, 与 G' 其他每一个元素相对应的 G 中元素的集合构成 H 的陪集, 群 G' 与群 G 关于 H 的商群同构, $G' \approx G/H$, H 称为同态对应的核.

证明 证明过程主要用到与群 G 元素对应的 G' 元素是唯一确定的. 先证明与 G' 恒元 E' 相对应的 G 中元素的集合 H 构成群 G 的子群, 再证明它是不变子群, 最后, 证明与 G' 其他元素 R' 相对应的 G 中元素的集合构成 H 的陪集 RH. 由此, G' 与商群 G/H 同构是显然的.

设所有与 G' 中恒元 E' 对应的 G 中元素构成子集 H, $H = \{S_1, S_2, \cdots, S_h\}$. 由于 $G' \sim G$, $S_\mu S_\nu$ 仍对应 E', 故属于子集 H, 即子集 H 对元素乘积封闭. 将 G 中恒元 E 对应 G' 中的元素记作 T', 则 ES_μ 对应 $T'E' = T'$, 但 $ES_\mu = S_\mu$ 对应 E'. 因为 G 中元素对应的 G' 中元素是唯一的, 所以 $T' = E'$, 即恒元 E 属于子集 H. 将 G 中任意元素 R 及其逆元 R^{-1} 对应的 G' 中元素分别记作 R' 和 P', 则 $R^{-1}R = E$ 既对应 $P'R'$ 又对应 E', 由唯一性知, $P' = R'^{-1}$. G 中互逆的元素对应 G' 中的元素也互逆, 因而 S_μ 的逆元 S_μ^{-1} 也对应 G' 中恒元 E', 也属于 H. 子集 H 满足群的四个条件, 故是 G 的子群. 又因为 $RS_\mu R^{-1}$ 对应 G' 中元素 $R'E'R'^{-1} = E'$, 所以 H 是 G 的不变子群.

H 陪集 RH 的元素都对应 G' 中元素 $R'E' = R'$. 反之, 将与 G' 中 R' 对应的 G 中任意元素记作 R_μ, 则因 $R'^{-1}R' = E'$, $R^{-1}R_\mu$ 对应 G' 中的恒元, 故 $R^{-1}R_\mu \in H$, 即 R 和 R_μ 同属陪集 RH. 这样, 我们证明了商群 G/H 的每一个复元素 H 或 RH 分别与 G' 中元素 E' 或 R' 存在一一对应关系, 它们的乘积也以同一规则一一对应, 因此 $G/H \approx G'$. 证完.

定理二说明, 当 $G' \sim G$ 时, G' 反映了 G 中商群 G/H 的性质, 但同态对应的核 H 内部元素的差别没有被反映出来.

今后我们会经常遇到如下命题：一个集合 G' 的元素与已知群 G 的元素间有一一对应或一多对应关系, 而且这对应关系对元素乘积保持不变, 要证明集合 G' 构成群, 且与已知群 G 同构或同态. 下面的定理给出了此命题.

定理三 设 G 是一已知群, G' 是一个定义了乘积规则又对此乘积规则封闭的集合, 若群 G 中任一元素 R 都按某种规则唯一地对应集合 G' 中一个确定元素 R', G' 中任一元素 R' 至少对应 G 中一个元素 R, 而且这种一一对应或一多对应的关系对元素乘积保持不变, 则集合 G' 构成群, 且与已知群 G 同构或同态.

证明 此定理只需证明集合 G' 构成群, 然后由定义可知它同构或同态于群 G. 证明方法仍是用与群 G 元素对应的 G' 元素的唯一性. 下面按一多对应情况来证明, 一一对应情况的证明是完全一样的.

集合 G' 对元素乘积的封闭性已由定理的假设条件给出. 设 $R' \longleftarrow R$, $S' \longleftarrow S$ 和 $T' \longleftarrow T$, 则 $R'S' \longleftarrow RS$, $S'T' \longleftarrow ST$, 且 $(R'S')T' \longleftarrow (RS)T$, $R'(S'T') \longleftarrow R(ST)$, 由 $(RS)T = R(ST)$ 得 $(R'S')T' = R'(S'T')$, 集合 G' 的元素乘积满足结合律. 同理, 由 $E' \longleftarrow E$, $R' \longleftarrow R$ 和 $E'R' \longleftarrow ER = R$ 得 $E'R' = R'$, 集合 G' 包含恒元 E'. 又设 $P' \longleftarrow R^{-1}$, $P'R' \longleftarrow R^{-1}R = E$, 则 $P'R' = E'$, P' 是 R' 的逆元, 存在于集合 G' 中. 证完.

2.5 正多面体的固有对称变换群

三维空间的纯粹转动称为固有转动, 它保持坐标系手征性不变, 即右手坐标系经变换仍是右手坐标系. 如果转动后再做空间反演, 它改变坐标系的手征性, 把右手坐标系变成左手坐标系, 称为非固有转动. 两类转动都保持坐标系原点不变, 保持空间任意点到原点的距离不变. 由固有转动的集合构成的有限群称为固有点群, 前面讨论的 C_N 群和 D_N 群都是固有点群, 由两类转动的集合构成的有限群称为非固有点群, 简称点群.

正多面体是三维空间具有较大对称性的几何图形, 把它的中心放在坐标原点, 它的对称变换就都保持原点不变, 对称变换群是点群, 称为正多面体的点群, 其中包含的固有转动变换集合也构成群, 称为正多面体的固有点群. 本节先研究正四面体

(tetrahedron)、正八面体 (octahedron) 和立方体 (cube) 的固有点群, 再一般讨论存在哪些正多面体, 最后研究正十二面体 (dolecahedron) 和正二十面体 (icosahedron) 的固有点群, 下节再讨论正多面体的非固有点群.

一、正四面体、正八面体和立方体

正四面体、正八面体和立方体有密切关系. 如图 2.2 建立直角坐标系, 原点在立方体的中心, 坐标轴指向三个面的中心, 在 xy 平面上方的四个顶点, 按逆时针取向, 顺序记作 A_1, A_2, A_3 和 A_4, 其中 A_1 在第一卦限. 在 xy 平面下方的四个顶点分别记作 B_j, 对原点对称的两顶点有相同的下标. 立方体六个侧面的中心及其连线和面构成正八面体, 而正八面体八个侧面的中心及其连线和面也构成立方体. 立方体和正八面体的这种关系互称为共轭图形, 它们有着完全相同的对称变换群. 立方体和正八面体的固有点群记作 O. 立方体中不相邻的顶点 A_1, A_3, B_2 和 B_4 及其连线和面构成正四面体. 正四面体是自共轭图形. 正四面体的对称变换都是立方体的对称变换, 反之则不然. 正四面体的固有点群记作 T, 它是立方体固有点群 O 的子群.

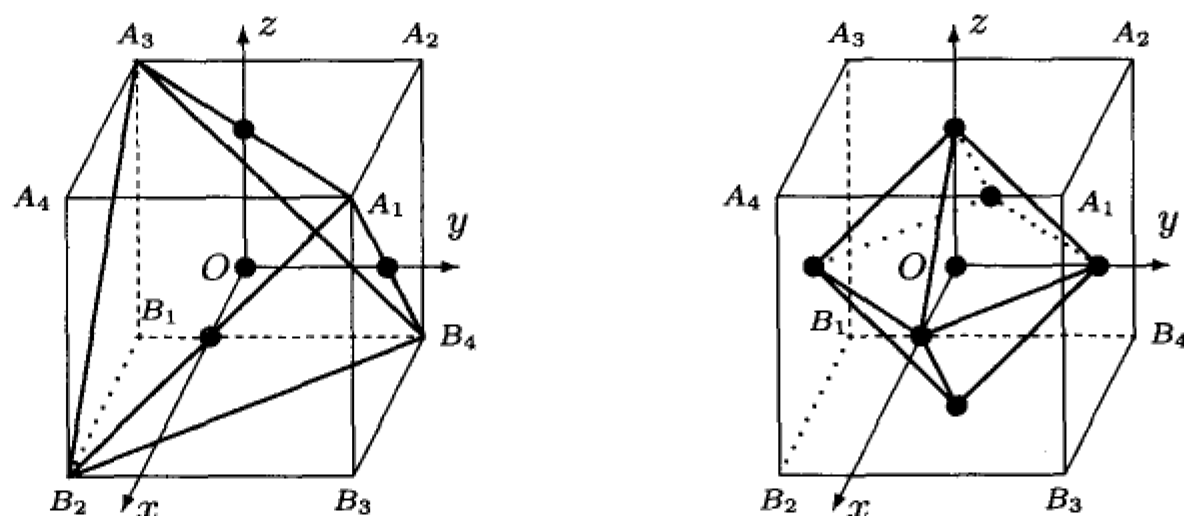


图 2.2 立方体、正四面体和正八面体的示意图

从图 2.2 可以看出, 三个坐标轴是立方体的四次固有转动轴, 但对正四面体来说, 它们只是二次轴. 用 T_μ, $\mu = x,\ y,\ z$, 表示绕三个坐标轴正向转动 $\pi/2$ 角的变换, T_μ^2 才属于 T 群. 立方体四根对角线方向是三次固有转动轴, 分别以指向正四面体顶点方向为正向, 绕这些轴转动 $2\pi/3$ 角的变换分别记作 R_j. 用坐标轴单位矢量表出它们的方向如下

$$\begin{aligned}
&R_1: \quad \text{由}B_1\text{指向}A_1, \quad (\boldsymbol{e}_x + \boldsymbol{e}_y + \boldsymbol{e}_z)/\sqrt{3} \\
&R_2: \quad \text{由}A_2\text{指向}B_2, \quad (\boldsymbol{e}_x - \boldsymbol{e}_y - \boldsymbol{e}_z)/\sqrt{3} \\
&R_3: \quad \text{由}B_3\text{指向}A_3, \quad (-\boldsymbol{e}_x - \boldsymbol{e}_y + \boldsymbol{e}_z)/\sqrt{3} \\
&R_4: \quad \text{由}A_4\text{指向}B_4, \quad (-\boldsymbol{e}_x + \boldsymbol{e}_y - \boldsymbol{e}_z)/\sqrt{3}
\end{aligned} \tag{2.21}$$

它们及其逆元 R_j^2, $1 \leqslant j \leqslant 4$, 都同时属于 T 群和 O 群. 此外, 联结立方体相对棱中点的连线是立方体的六个二次固有转动轴, 绕这些轴转动 π 角的变换记作 S_k,

$1 \leqslant k \leqslant 6$. 它们的具体取向如下

$$\begin{array}{llll} S_1: & (\boldsymbol{e}_x+\boldsymbol{e}_y)/\sqrt{2}, & S_2: & (\boldsymbol{e}_x-\boldsymbol{e}_y)/\sqrt{2} \\ S_3: & (\boldsymbol{e}_y+\boldsymbol{e}_z)/\sqrt{2}, & S_4: & (\boldsymbol{e}_y-\boldsymbol{e}_z)/\sqrt{2} \\ S_5: & (\boldsymbol{e}_x+\boldsymbol{e}_z)/\sqrt{2}, & S_6: & (\boldsymbol{e}_x-\boldsymbol{e}_z)/\sqrt{2} \end{array} \tag{2.22}$$

它们不属于 T 群, 只属于 O 群.

先研究正四面体及其固有点群 T 的性质. T 群包含三个互相垂直的二次轴和四个对称分布的三次轴, 共 12 个元素. 设正四面体的棱长为 1, 外接圆半径记作 R, 内切圆半径记作 r, 相邻的三次轴和二次轴的夹角记作 θ, 两相邻三次轴正向间的夹角为 2θ, 则有

$$R=\sqrt{3/8}, \qquad r=\sqrt{1/24}, \qquad \cos\theta=\sqrt{1/3}, \qquad \cos(2\theta)=-1/3, \qquad \theta=54.73^\circ \tag{2.23}$$

因为三次转动把三个二次轴联系起来, 而二次转动把三次轴正向两两联系起来, 所以 T 群包含的三个二次轴互相等价, 四个三次轴也互相等价, 但三次轴不是双向轴. 由于绕等价轴旋转相同角度的变换互相共轭, T 群包含四个类: 恒元构成一类, 三个二次转动 T_μ^2 构成一类, 绕三次轴正向转动 $2\pi/3$ 角的四个变换 R_j 构成一类, 它们的逆元 R_j^2 构成另一类. 前两个类是自逆类, 后两个类互为相逆类. 各类元素数目分别是 1, 3, 4 和 4. 因为子群阶数必须是原群阶数的约数, 所以 T 群只有一个不变子群 D_2, 它由前两个类合成, 商群是三阶循环群, $\mathrm{T}/\mathrm{D}_2 \approx \mathrm{C}_3$.

再研究立方体及其固有点群 O 的性质. O 群包含三个互相垂直的四次轴, 四个三次轴, 和六个二次轴, 共有 24 个元素. 四个三次轴围绕四次轴对称分布, 与四次轴的夹角为 θ, 由式 (2.23) 给出, 每个二次轴都平分相邻的四次轴, 与四次轴夹角为 $\pi/4$, 也平分相邻的三次轴, 与三次轴夹角为 $\pi/2-\theta$. 设立方体的棱长为 1, 外接圆半径 R 和内切圆半径 r 为

$$R=\sqrt{3}/2\ , \qquad r=1/2 \tag{2.24}$$

由于四次轴的存在, 所有四次轴和三次轴分别是等价的和双向的, 所有二次轴是等价的. O 群包含五个类: 恒元构成一类, 八个三次转动 $R_j^{\pm 1}$ 构成一类, 四次轴中三个转动 π 角的元素 T_μ^2 构成一类, 六个转动 $\pm\pi/2$ 角的元素 $T_\mu^{\pm 1}$ 构成一类, 六个二次转动 S_k 构成一类. 所有类都是自逆类. T 群是 O 群的指数为 2 的不变子群, 商群同构于 V_2 群. T 群的不变子群 D_2 也是 O 群的不变子群, 两个陪集 $R_1\mathrm{D}_2$ 和 $R_1^2\mathrm{D}_2$ 属于子群 T, 另三个陪集 $T_x\mathrm{D}_2$, $T_y\mathrm{D}_2$ 和 $T_z\mathrm{D}_2$ 不属于子群 T. 作为复元素, 后三个陪集的平方都等于不变子群 D_2, 因为它们分别包含 T_x^2, T_y^2 和 T_z^2. 这就是说, 商群 O/D_2 同构于 D_3 群.

二、T 群和 O 群的乘法表

在 2.2 节我们曾用表 2.5 填写 D_3 群乘法表 2.6, 这个方法可以推广. 对阶数较

高的有限群, 填乘法表的工作量会比较大, 这时由子群乘法表扩充的办法, 可以减轻工作量. 方法的主要精神如下：找群 G 的一个尽可能大的子群 H, 它不一定是不变子群. 设它的阶数为 h, 指数为 d, 群元素记作 S_μ, 乘法表已经知道. 把群 G 元素分解为子群及其陪集之并

$$G = H \cup R_2H \cup \cdots \cup R_dH = H \cup HR_2 \cup \cdots \cup HR_d$$

R_j 可以随意选择, 根据经验, 选所有 R_j 是同一元素的幂, 可以简化计算. 为符号统一起见, 令 $R_1 = E$ 和 $R_1H = HR_1 = H$. 一旦 R_j 选定了, 通过类似表 2.5, 计算所有左陪集元素 $R_jS_\mu = X_{j\mu}$. 等式两边取逆元, 就得右陪集元素 $S_\nu R_k = Y_{\nu k}$. 凡是不属于子群 H 的元素都既可表为左陪集的元素 $X_{j\mu}$, 也可表为右陪集的元素 $Y_{\nu k}$, 即 $Y_{\nu k}$ 也可表为 $R_{j'}S_\mu$ 的形式, 由此算得 $R_jS_\nu R_k$. 把这些乘积结果排列成陪集表. 根据子群 H 的乘法表及其陪集表, 就可以简单地计算出群 G 任何两元素的乘积. 例如, 要计算元素的乘积 XY, 根据陪集表把 X 表成 R_jS_μ, 把 Y 表成 $S_\nu R_k$, 从 H 乘法表中查出 $S_\mu S_\nu$, 就可在陪集表中查出 $XY = R_j(S_\mu S_\nu)R_k$ 的结果.

如果群 G 的阶数不太大, 则可用如下方法列出群 G 的乘法表：把群 G 乘法表分成 d^2 个小方块, 子群 H 的乘法表列在第一行第一列的小方块位置. 把子群 H 乘法表中元素 S_μ 逐次换成 $R_jS_\mu R_k$, 顺序排列在 G 乘法表的第 j 行第 k 列的小方块位置. 这样就填完了群 G 的乘法表.

用此方法计算 T 群的乘法表. 根据 T 群每个元素的几何意义, 从图 2.2 中找出四个顶点经此变换分别移动到什么新位置. 先确定 A_1 点的新位置, 再确定棱 A_1A_3 的新位置, 最后, 沿 A_1 到 A_3 方向, 左侧是 B_2, 右侧是 B_4. 计算结果列于表 2.7. 两元素的乘积就是相继做两次变换, 看经此变换顶点 A_1 和 A_3 变到什么位置, 再与表 2.7 比较, 定出乘积元素.

表 2.7 正四面体的固有对称变换

	E	T_x^2	T_y^2	T_z^2	R_1	R_1^2	R_2	R_2^2	R_3	R_3^2	R_4	R_4^2
A_1	A_1	B_2	B_4	A_3	A_1	A_1	A_3	B_4	B_4	B_2	B_2	A_3
A_3	A_3	B_4	B_2	A_1	B_2	B_4	B_4	A_1	A_3	A_3	A_1	B_2
B_2	B_2	A_1	A_3	B_4	B_4	A_3	B_2	B_2	A_1	B_4	A_3	A_1
B_4	B_4	A_3	A_1	B_2	A_3	B_2	A_1	A_3	B_2	A_1	B_4	B_4

取 T 群的不变子群 H =D_2, 它包含四个元素 E, T_x^2, T_y^2 和 T_z^2. D_2 群同构于 V_4 群, 乘法表如表 2.3 右图所示. 选陪集代表元素为 R_1 和 R_1^2, 由表 2.7 很容易算得 D_2 群的两个左陪集, 填入陪集表的前两行. 把这些关系式两边取逆元, 就得到 D_2 群的两个右陪集, 填入陪集表的三和四行. 再在这些等式左边乘 R_1 或 R_1^2, 填入陪集表的后四行. 例如, 由等式 $R_1T_x^2 = R_3$ 和 $R_1^2T_x^2 = R_4^2$ 等, 取逆元得 $T_x^2R_1^2 = R_3^2$ 和 $T_x^2R_1 = R_4$ 等, 再由陪集表中的前四行计算后四行 (见表 2.8)

$$R_1\left(T_x^2R_1\right)=R_1\left(R_4\right)=R_1\left(R_1T_z^2\right)=R_2^2,\qquad R_1^2\left(T_x^2R_1\right)=R_1^2\left(R_1T_z^2\right)=T_z^2\ ,$$
$$R_1\left(T_x^2R_1^2\right)=R_1\left(R_3^2\right)=R_1\left(R_1^2T_y^2\right)=T_y^2,\qquad R_1^2\left(T_x^2R_1^2\right)=R_1^2\left(R_1^2T_y^2\right)=R_2$$

表 2.8　T群关于子群 D_2 的陪集表

左乘	E	T_x^2	T_y^2	T_z^2	右乘
R_1	R_1	R_3	R_2	R_4	
R_1^2	R_1^2	R_4^2	R_3^2	R_2^2	
	R_1	R_4	R_3	R_2	R_1
	R_1^2	R_3^2	R_2^2	R_4^2	R_1^2
R_1	R_1^2	R_2^2	R_4^2	R_3^2	R_1
R_1	E	T_y^2	T_z^2	T_x^2	R_1^2
R_1^2	E	T_z^2	T_x^2	T_y^2	R_1
R_1^2	R_1	R_2	R_4	R_3	R_1^2

把群 T 乘法表分成三行三列共九个小方块. 子群 D_2 乘法表列在群 T 乘法表左上角的第一行第一列. 把陪集表中第一行和第二行的元素分别替换子群乘法表中的元素, 填在群 T 乘法表第一列的第二和第三小方块. 把陪集表中第三行和第四行的元素分别替换子群乘法表中的元素, 填在群 T 乘法表第一行的第二和第三小方块. 把陪集表中第五行和第六行的元素分别替换子群乘法表中的元素, 填在群 T 乘法表第二行的第二和第三小方块. 把陪集表中第七行和第八行的元素分别替换子群乘法表中的元素, 填在群 T 乘法表第三行的第二和第三小方块. 这样就完成了群 T 的乘法表 (见表 2.9).

表 2.9　正四面体固有对称群 T 的乘法表

	E	T_x^2	T_y^2	T_z^2	R_1	R_4	R_3	R_2	R_1^2	R_3^2	R_2^2	R_4^2
E	E	T_x^2	T_y^2	T_z^2	R_1	R_4	R_3	R_2	R_1^2	R_3^2	R_2^2	R_4^2
T_x^2	T_x^2	E	T_z^2	T_y^2	R_4	R_1	R_2	R_3	R_3^2	R_1^2	R_4^2	R_2^2
T_y^2	T_y^2	T_z^2	E	T_x^2	R_3	R_2	R_1	R_4	R_2^2	R_4^2	R_1^2	R_3^2
T_z^2	T_z^2	T_y^2	T_x^2	E	R_2	R_3	R_4	R_1	R_4^2	R_2^2	R_3^2	R_1^2
R_1	R_1	R_3	R_2	R_4	R_1^2	R_2^2	R_4^2	R_3^2	E	T_y^2	T_z^2	T_x^2
R_3	R_3	R_1	R_4	R_2	R_2^2	R_1^2	R_3^2	R_4^2	T_y^2	E	T_x^2	T_z^2
R_2	R_2	R_4	R_1	R_3	R_4^2	R_3^2	R_1^2	R_2^2	T_z^2	T_x^2	E	T_y^2
R_4	R_4	R_2	R_3	R_1	R_3^2	R_4^2	R_2^2	R_1^2	T_x^2	T_z^2	T_y^2	E
R_1^2	R_1^2	R_4^2	R_3^2	R_2^2	E	T_z^2	T_x^2	T_y^2	R_1	R_2	R_4	R_3
R_4^2	R_4^2	R_1^2	R_2^2	R_3^2	T_z^2	E	T_y^2	T_x^2	R_2	R_1	R_3	R_4
R_3^2	R_3^2	R_2^2	R_1^2	R_4^2	T_x^2	T_y^2	E	T_z^2	R_4	R_3	R_1	R_2
R_2^2	R_2^2	R_3^2	R_4^2	R_1^2	T_y^2	T_x^2	T_z^2	E	R_3	R_4	R_2	R_1

如果选循环子群 $C_3=\{E,\ R_1,\ R_1^2\}$ 作为子群 H, 由于子群指数为 4, T 群的乘法表被分成 16 块. 另一方面, 在计算陪集元素时, 要充分利用子群 D_2 元素的乘积

关系以简化计算. 作为练习, 习题第 14 题请读者以此法重新填写 T 群的乘法表.

现在来计算 O 群的乘法表. T 群是 O 群的指数为 2 的不变子群. 陪集中的代表元素可随意选取, 但选取二次转动如 S_1 会比较方便. 扩充表 2.7, 根据每一个陪集元素的几何意义, 在图 2.2 上找出经此变换后 A_1 和 A_3 点的新位置, 列在表 2.10 中, 对陪集代表元素 S_1 则需要列出所有八个顶点的新位置, 以便计算 O 群关于子群 T 的陪集表 2.11. 具体说, 先把 S_1 左乘到子群元素上, 算得表 2.11 的第一行, 再把此乘积关系两边取逆元, 得到表 2.11 的第二行, 最后把右陪集元素表为 S_1 和子群元素的乘积, 得到表 2.11 的第三行. 有了表 2.9 和 2.11 就可以计算 O 群任何两个元素的乘积. 例如, 计算 T_xS_3. 在表 2.11 中查出 $T_x = S_1R_3$ 和 $S_3 = R_4^2S_1$, 再由表 2.9 查出 $R_3R_4^2 = T_z^2$, 根据表 2.11 查得 $T_xS_3 = S_1T_z^2S_1 = T_z^2$.

表 2.10 立方体的部分固有对称变换

	T_x	T_x^3	T_y	T_y^3	T_z	T_z^3	S_1	S_2	S_3	S_4	S_5	S_6
A_1	A_4	B_3	B_3	A_2	A_2	A_4	B_3	B_1	A_2	B_1	A_4	B_1
A_3	B_1	A_2	A_4	B_1	A_4	A_2	B_1	B_3	B_3	A_4	B_3	A_2

	A_1	A_2	A_3	A_4	B_1	B_2	B_3	B_4
S_1	B_3	B_2	B_1	B_4	A_3	A_2	A_1	A_4

表 2.11 O群关于子群 T 的陪集表

左乘	E	T_x^2	T_y^2	T_z^2	R_1	R_4	R_3	R_2	R_1^2	R_3^2	R_2^2	R_4^2	右乘
S_1	S_1	T_z	T_z^3	S_2	T_x^3	S_3	T_x	S_4	T_y	T_y^3	S_5	S_6	
	S_1	T_z^3	T_z	S_2	T_y^3	S_6	T_y	S_5	T_x	T_x^3	S_4	S_3	S_1
S_1	E	T_y^2	T_x^2	T_z^2	R_3^2	R_4^2	R_1^2	R_2^2	R_3	R_1	R_2	R_4	S_1

* 三、正多面体

正 N 面体的侧面是 N 个全等的正多边形, 设为正 n 边形. 侧面的边界是棱, 每条棱联结两个顶点, 又为两个侧面所共有. 设正 N 面体包含 L 条棱和 V 个顶点, 每个顶点有 m 条棱相会, 即每个顶点为 m 条棱所共有, 也为 m 个侧面所共有. 根据这些简单的几何联系可写出上述参数间的关系式

$$nN = 2L = mV \tag{2.25}$$

当侧面是正三角形时, $n = 3$, 由于三角形内角是 $\pi/3$, m 个三角形交会要构成立体图形, m 只能等于 3, 4 或 5, 分别对应正四面体 ($m = 3$), 正八面体 ($m = 4$) 和正二十面体 ($m = 5$). 同理, 当侧面是正方形或正五边形时, $n = 4$ 或 5, m 只能等于 3, 分别对应正六面体 (立方体) 和正十二面体. 侧面的正多角形的边数超过 5 时, 由于内角太大, 无法构成立体图形. 可能的正多面体只有这五种, 它们的参数列于表 2.12.

表 2.12 正多面体的参数

侧面数 N	4	6	8	12	20
顶点数 V	4	8	6	20	12
侧面多边形边数 n	3	4	3	5	3
交于每顶点棱数 m	3	3	4	3	5
总棱数 L	6	12	12	30	30
固有点群	T	O	O	I	I
固有点群阶数 $2L$	12	24	24	60	60

把正多面体各个侧面的中心作为顶点联结起来构成的图形也是正多面体, 称为原正多面体的对偶正多面体. 图形的对偶关系是相互的. 两对偶正多面体的面数 N 和顶点数 V 对换, 侧面边数 n 和在每个顶点交会的棱数 m 对换, 总棱数 L 保持不变. 正八面体的对偶图形是正六面体, 正二十面体的对偶图形是正十二面体, 正四面体与自己对偶, 是自对偶图形. 显然互相对偶的正多面体有相同的对称变换群. 正四面体的固有点群为 T, 立方体和正八面体的固有点群为 O, 正十二面体和正二十面体的固有点群记作 I. 把正多面体中心放在坐标原点. 正多面体的位置可由一条棱的位置来确定, 每个对称变换可由这条棱在变换后的新位置来描写. 经过对称变换, 这条棱可置于 L 条棱中的任一条位置, 再考虑棱的两种取向, 因此正 N 面体的固有点群包含 $2L$ 个元素. I 群的阶数为 60.

* 四、正十二面体、正二十面体和点群 I

正十二面体和正二十面体有相同的固有对称变换群 I. 把正二十面体中心 O 和原点重合 (见图 2.3), 一对顶点 A_0 和 B_0 置于 z 轴上, A_0 在正 z 向, 与 A_0 相邻的五个顶点, 按正 z 轴的右手螺旋方向, 顺序记作 A_j, $1 \leqslant j \leqslant 5$, A_1 在 xz 平面内的偏正 x 方向. 在 xy 平面下方的六个顶点分别记作 B_j, $0 \leqslant j \leqslant 5$, 对原点对称的两顶点有相同的下标.

由 B_j 指向 A_j 的六个轴都是正二十面体的五次转动轴, 绕它们转动 $2\pi/5$ 角的变换分别记作 T_j, $0 \leqslant j \leqslant 5$. 除一个五次轴沿正 z 轴方向外, 其余五个五次轴正向的极角都是 θ_1, 方位角分别为 $\varphi_j^{(1)}$. 两个相对侧面中心的联线都是三次轴, 都以偏正 z 方向为正向, 绕它们转动 $2\pi/3$ 角的变换分别记作 R_j, $1 \leqslant j \leqslant 10$. 前五个三次轴 $(1 \leqslant j \leqslant 5)$ 正向的极角都是 θ_2, 后五个三次轴 $(6 \leqslant j \leqslant 10)$ 正向的极角都是 θ_3, 方位角分别为 $\varphi_j^{(2)}$. 例如, R_1 的转轴是由 O 点指向 $\Delta A_0A_1A_2$ 的中心, 而 R_6 的转轴是由 O 点指向 $\Delta A_1B_4A_2$ 的中心. 两个相对棱中点的联线都是二次轴, 绕它们转动 π 角的变换分别记作 S_j, $1 \leqslant j \leqslant 15$, 前五个二次轴 $(1 \leqslant j \leqslant 5)$ 的极角都是 θ_4, 方位角分别为 $\varphi_j^{(1)}$, 次五个二次轴 $(6 \leqslant j \leqslant 10)$ 的极角都是 θ_5, 方位角分别为 $\varphi_j^{(2)}$, 最后五个二次轴 $(11 \leqslant j \leqslant 15)$ 在 xy 平面, 极角为 π, 方位角分别为 $\varphi_j^{(3)}$. 例如, S_1 的转轴由 O 点指向 A_0A_1 的中点, S_6 的转轴由 O 点指向 A_1A_2 的中点, 而 S_{11} 的

转轴由 O 点指向 A_1B_4 的中点. S_{12} 的转轴是 y 轴. 上述这些角度列于下式

$$\begin{aligned}
&\tan\theta_1 = 2\ , && \tan\theta_2 = 3-\sqrt{5}\ , && \tan\theta_3 = 3+\sqrt{5} \\
&\tan\theta_4 = (\sqrt{5}-1)/2\ , && \tan\theta_5 = (\sqrt{5}+1)/2\ , && \theta_1 = 2\theta_4 \approx 63.43^\circ \\
&\theta_2 \approx 37.38^\circ, && \theta_3 \approx 79.19^\circ, && \theta_5 \approx 58.28^\circ \\
&\varphi_j^{(1)} = 2(j-1)\pi/5\ , && \varphi_j^{(2)} = (2j-1)\pi/5\ , && \varphi_j^{(3)} = (4j-3)\pi/10
\end{aligned} \tag{2.26}$$

设正二十面体的棱长为 1, 外接圆半径 R 和内切圆半径 r 分别为

$$R = \left(\frac{5+\sqrt{5}}{8}\right)^{1/2} = 0.9511\ , \qquad r = \frac{3+\sqrt{5}}{4\sqrt{3}} = 0.7558 \tag{2.27}$$

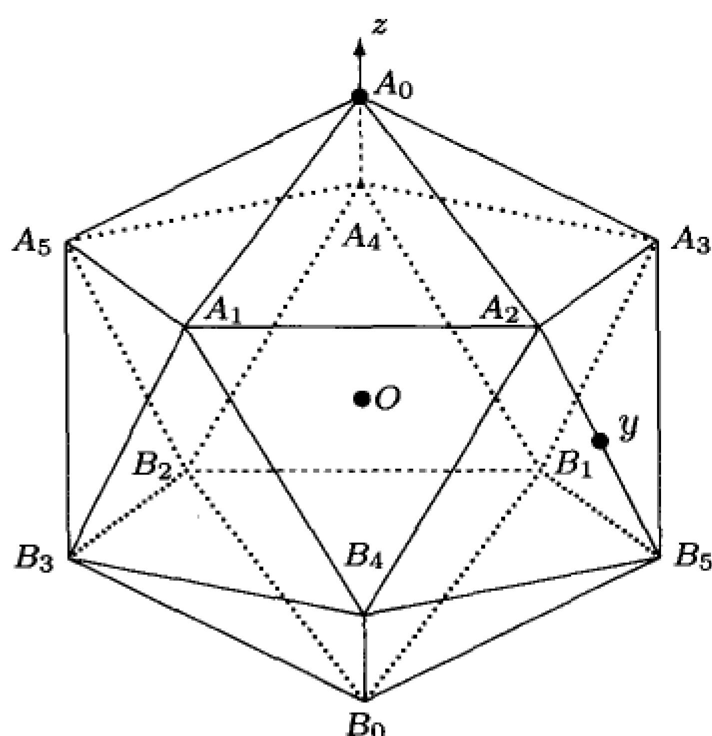


图 2.3 正二十面体示意图

正二十面体具有很高的对称性. 五次转动使所有五次轴和所有三次轴分别互相等价, 且都为双向轴, 所有二次轴也互相等价. 因此, I 群包含五个类: 恒元构成一类, 15 个二次轴转动元素 S_j 构成一类, 绕 10 个三次轴转动 $\pm 2\pi/3$ 角的元素 $R_j^{\pm 1}$ 构成一类, 绕 6 个五次轴转动 $\pm 2\pi/5$ 角的元素 $T_j^{\pm 1}$ 构成一类, 转动 $\pm 4\pi/5$ 角的元素 $T_j^{\pm 2}$ 构成另一类. 五个类都是自逆类, 它们包含的元素数目分别为 1, 15, 20, 12 和 12. I 群没有非平庸的不变子群.

I 群有一个明显的子群 D_5, 它由沿 z 轴的五次轴转动和处于 xy 平面的五个二次轴转动元素组成. D_5 群有 10 个元素, 指数为 6, 陪集的代表元素无法表成一个元素的幂, 使它的陪集表不易计算. 由图 2.3 看到, I 群有互相垂直的二次轴, 在三个互相垂直的二次轴的对称位置有三次轴, 它们构成子群 T. T 群有 12 个元素, 指数为 5, 陪集代表元素可以选 T_0 的幂次, 从而简化陪集表的计算. 由图 2.3 可知, S_{12} 是绕 y 轴的转动, S_1 和 S_8 的转轴都在 xz 平面, 稍偏离 z 和 x 轴. 这三个转动轴

互相垂直, 把它们看作坐标轴, 就可以找出所需要的四个三次轴, 从而构成子群 T. I 群部分元素和 T 群元素的具体对应关系如下

$$R_6^{\pm 1} \longleftrightarrow R_1^{\pm 1}, \qquad R_2^{\mp 1} \longleftrightarrow R_2^{\pm 1}, \qquad R_4^{\pm 1} \longleftrightarrow R_3^{\pm 1}, \qquad R_{10}^{\mp 1} \longleftrightarrow R_4^{\pm 1}$$

$$S_8 \longleftrightarrow T_x^2, \qquad S_{12} \longleftrightarrow T_y^2, \qquad S_1 \longleftrightarrow T_z^2 \tag{2.28}$$

根据这一对应关系, 把 T 群乘法表 2.8 做替换后, 就得到 I 群的子群 T 的乘法表 2.13.

表 2.13 I 群的子群 T 的乘法表

	E	S_8	S_{12}	S_1	R_6	R_{10}^2	R_4	R_2^2	R_6^2	R_4^2	R_2	R_{10}
E	E	S_8	S_{12}	S_1	R_6	R_{10}^2	R_4	R_2^2	R_6^2	R_4^2	R_2	R_{10}
S_8	S_8	E	S_1	S_{12}	R_{10}^2	R_6	R_2^2	R_4	R_4^2	R_6^2	R_{10}	R_2
S_{12}	S_{12}	S_1	E	S_8	R_4	R_2^2	R_6	R_{10}^2	R_2	R_{10}	R_6^2	R_4^2
S_1	S_1	S_{12}	S_8	E	R_2^2	R_4	R_{10}^2	R_6	R_{10}	R_2	R_4^2	R_6^2
R_6	R_6	R_4	R_2^2	R_{10}^2	R_6^2	R_2	R_{10}	R_4^2	E	S_{12}	S_1	S_8
R_4	R_4	R_6	R_{10}^2	R_2^2	R_2	R_6^2	R_4^2	R_{10}	S_{12}	E	S_8	S_1
R_2^2	R_2^2	R_{10}^2	R_6	R_4	R_{10}	R_4^2	R_6^2	R_2	S_1	S_8	E	S_{12}
R_{10}^2	R_{10}^2	R_2^2	R_4	R_6	R_4^2	R_{10}	R_2	R_6^2	S_8	S_1	S_{12}	E
R_6^2	R_6^2	R_{10}	R_4^2	R_2	E	S_1	S_8	S_{12}	R_6	R_2^2	R_{10}^2	R_4
R_{10}	R_{10}	R_6^2	R_2	R_4^2	S_1	E	S_{12}	S_8	R_2^2	R_6	R_4	R_{10}^2
R_4^2	R_4^2	R_2	R_6^2	R_{10}	S_8	S_{12}	E	S_1	R_{10}^2	R_4	R_6	R_2^2
R_2	R_2	R_4^2	R_{10}	R_6^2	S_{12}	S_8	S_1	E	R_4	R_{10}^2	R_2^2	R_6

表 2.14 正二十面体的固有对称变换

	A_0	A_1		A_0	A_1		A_0	A_1		A_0	A_1
E	A_0	A_1	S_4	A_4	B_1	S_8	B_1	B_0	S_{12}	B_0	B_1
S_1	A_1	A_0	S_5	A_5	A_4	S_9	B_2	B_1	S_{13}	B_0	B_3
S_2	A_2	A_3	S_6	B_4	A_2	S_{10}	B_3	A_5	S_{14}	B_0	B_5
S_3	A_3	B_1	S_7	B_5	B_1	S_{11}	B_0	B_4	S_{15}	B_0	B_2
T_1	A_5	A_1	T_2	A_1	B_4	T_3	A_2	B_4	T_4	A_3	A_2
T_1^2	B_3	A_1	T_2^2	B_4	B_5	T_3^2	B_5	B_0	T_4^2	B_1	B_5
T_1^3	B_4	A_1	T_2^3	B_5	A_3	T_3^3	B_1	B_2	T_4^3	B_2	B_0
T_1^4	A_2	A_1	T_2^4	A_3	A_0	T_3^4	A_4	A_5	T_4^4	A_5	B_3
T_5	A_4	A_0	R_2	A_2	B_5	R_5	A_5	A_0	R_8	B_5	B_4
T_5^2	B_2	A_4	R_2^2	A_3	A_4	R_5^2	A_1	A_5	R_8^2	B_2	B_3
T_5^3	B_3	B_2	R_3	A_3	B_5	R_6	B_3	B_4	R_9	B_1	A_3
T_5^4	A_1	B_3	R_3^2	A_4	B_2	R_6^2	B_5	A_2	R_9^2	B_3	B_0
R_1	A_1	A_2	R_4	A_4	A_3	R_7	B_4	B_0	R_{10}	B_2	A_5
R_1^2	A_2	A_0	R_4^2	A_5	B_2	R_7^2	B_1	A_4	R_{10}^2	B_4	B_3

续表

	A_0	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5	B_0	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5
T_0	A_0	A_2	A_3	A_4	A_5	A_1	B_0	B_2	B_3	B_4	B_5	B_1
T_0^2	A_0	A_3	A_4	A_5	A_1	A_2	B_0	B_3	B_4	B_5	B_1	B_2
T_0^3	A_0	A_4	A_5	A_1	A_2	A_3	B_0	B_4	B_5	B_1	B_2	B_3
T_0^4	A_0	A_5	A_1	A_2	A_3	A_4	B_0	B_5	B_1	B_2	B_3	B_4

表 2.15　I 群关于子群 T 的陪集表

左乘	E	S_8	S_{12}	S_1	R_6	R_{10}^2	R_4	R_2^2	R_6^2	R_4^2	R_2	R_{10}	右乘
T_0	T_0	T_4^3	S_{15}	R_1^2	T_2^2	R_8	S_5	T_3^4	R_9	T_5^4	S_3	T_1^2	
T_0^2	T_0^2	R_9^2	S_{13}	T_2^4	S_7	T_4^2	R_5^2	T_1	T_5^2	T_3	R_3^2	S_6	
T_0^3	T_0^3	R_7	S_{11}	T_5	T_3^3	S_9	T_1^4	R_1	S_{10}	R_3	T_4^4	T_2^3	
T_0^4	T_0^4	T_3^2	S_{14}	R_5	R_8^2	T_5^3	T_4	S_2	T_1^3	S_4	T_2	R_7^2	
	T_0	T_3^3	S_{14}	R_5^2	T_1^2	R_7	S_4	T_2^4	R_8	T_4^4	S_2	T_5^2	T_0
	T_0^2	R_7^2	S_{11}	T_5^4	S_{10}	T_2^2	R_3^2	T_4	T_3^2	T_1	R_1^2	S_9	T_0^2
	T_0^3	R_9	S_{13}	T_2	T_5^3	S_6	T_3^4	R_3	S_7	R_5	T_1^4	T_4^3	T_0^3
	T_0^4	T_4^2	S_{15}	R_1	R_9^2	T_1^3	T_5	S_3	T_2^3	S_5	T_3	R_8^2	T_0^4
T_0	T_0^2	R_8^2	S_{12}	T_1^4	S_6	T_3^2	R_4^2	T_5	T_4^2	T_2	R_2^2	S_{10}	T_0
T_0	T_0^3	R_{10}	S_{14}	T_3	T_1^3	S_7	T_4^4	R_4	S_8	R_1	T_2^4	T_5^3	T_0^2
T_0	T_0^4	T_5^2	S_{11}	R_2	R_{10}^2	T_2^3	T_1	S_4	T_3^3	S_1	T_4	R_9^2	T_0^3
T_0	E	S_9	S_{13}	S_2	R_7	R_6^2	R_5	R_3^2	R_7^2	R_5^2	R_3	R_6	T_0^4
T_0^2	T_0^3	R_6	S_{15}	T_4	T_2^3	S_8	T_5^4	R_5	S_9	R_2	T_3^4	T_1^3	T_0
T_0^2	T_0^4	T_1^2	S_{12}	R_3	R_6^2	T_3^3	T_2	S_5	T_4^3	S_2	T_5	R_{10}^2	T_0^2
T_0^2	E	S_{10}	S_{14}	S_3	R_8	R_7^2	R_1	R_4^2	R_8^2	R_1^2	R_4	R_7	T_0^3
T_0^2	T_0	T_5^3	S_{11}	R_2^2	T_3^2	R_9	S_1	T_4^4	R_{10}	T_1^4	S_4	T_2^2	T_0^4
T_0^3	T_0^4	T_2^2	S_{13}	R_4	R_7^2	T_4^3	T_3	S_1	T_5^3	S_3	T_1	R_6^2	T_0
T_0^3	E	S_6	S_{15}	S_4	R_9	R_8^2	R_2	R_5^2	R_9^2	R_2^2	R_5	R_8	T_0^2
T_0^3	T_0	T_1^3	S_{12}	R_3^2	T_4^2	R_{10}	S_2	T_5^4	R_6	T_2^4	S_5	T_3^2	T_0^3
T_0^3	T_0^2	R_{10}^2	S_{14}	T_3^4	S_8	T_5^2	R_1^2	T_2	T_1^2	T_4	R_4^2	S_7	T_0^4
T_0^4	E	S_7	S_{11}	S_5	R_{10}	R_9^2	R_3	R_1^2	R_{10}^2	R_3^2	R_1	R_9	T_0
T_0^4	T_0	T_2^3	S_{13}	R_4^2	T_5^2	R_6	S_3	T_1^4	R_7	T_3^4	S_1	T_4^2	T_0^2
T_0^4	T_0^2	R_6^2	S_{15}	T_4^4	S_9	T_1^2	R_2^2	T_3	T_2^2	T_5	R_5^2	S_8	T_0^3
T_0^4	T_0^3	R_8	S_{12}	T_1	T_4^3	S_{10}	T_2^4	R_2	S_6	R_4	T_5^4	T_3^3	T_0^4

用四个五次转动 T_0^m, $1 \leqslant m \leqslant 4$, 作为陪集的代表元素. 根据 I 群每个元素的几何意义, 从图 2.3 确定两点 A_0 和 A_1 经此变换后的新位置, 列于表 2.14. 对陪集的代表元素 T_0^m, 则需要列出正二十面体所有 12 个顶点位置变化的相对关系, 以便计算 I 群关于子群 T 的陪集表 2.15. 由子群 T 的乘法表 2.13 及其陪集表 2.15, 可以计算 I 群任何两个元素的乘积. 例如, 计算 $S_{10}T_3^3$. 根据陪集表 2.15 把 S_{10} 表成左陪集的元素, $S_{10} = T_0^3 R_6^2$, T_3^3 表成右陪集的元素, $T_3^3 = S_8 T_0$, 由乘法表 2.13 查出

$R_6^2S_8 = R_{10}$, 最后由陪集表 2.15 查得 $S_{10}T_3^3 = T_0^3R_{10}T_0 = R_6^2$.

2.6 群的直接乘积和非固有点群

一、群的直接乘积

定义 设群 H_1 和 H_2 是群 G 的两个子群

$$H_1 = \{R_1,\ R_2,\ \cdots,\ R_{h_1}\}\ , \qquad H_2 = \{S_1,\ S_2,\ \cdots,\ S_{h_2}\} \tag{2.29}$$

满足:

(1) 除恒元 $R_1 = S_1 = E$ 外, 子群 H_1 和 H_2 无公共元素;

(2) 分属两子群的元素乘积可以对易, 即若 $R_j \in H_1, S_\mu \in H_2$, 则 $R_jS_\mu = S_\mu R_j$;

(3) 群 G 是所有形如 R_jS_μ 的元素构成的集合.

则群 G 称为群 H_1 和 H_2 的直接乘积, 简称直乘, 记作 $G = H_1 \otimes H_2$. 群 H_1 和群 H_2 都是群 G 的不变子群.

集合 $\{R_jS_\mu\}$ 中不会有重复元素. 因为若有 $R_jS_\mu = R_kS_\nu$, 则 $R_k^{-1}R_j = S_\nu S_\mu^{-1}$, 它们分属两个子群, 故只能等于公共的恒元 E, 即 $R_j = R_k$ 和 $S_\mu = S_\nu$. 因此, 直乘群 G 的阶等于两子群的阶数乘积, $g = h_1h_2$.

在实际问题中, 我们经常遇到的情况是, 由式 (2.29) 给出的两个群 H_1 和 H_2 分别作用于两个不同的对象上, 因而分属两群的元素乘积可以对易

$$R_jS_\mu = S_\mu R_j \tag{2.30}$$

设两群的恒元分别为 R_1 和 S_1. 重新定义两个同构的群 H_1S_1 和 R_1H_2. 补上的恒元不影响两群元素的乘积规则, 但使两群有了公共的恒元 R_1S_1. 定义集合

$$G = \{R_jS_\mu | R_j \in H_1, S_\mu \in H_2\} \tag{2.31}$$

在原来的元素乘积定义下, 由于式 (2.30), 集合 G 显然满足群的四个条件, 因而构成群, 称为群 H_1 和 H_2 的直接乘积.

二、非固有点群

我们先来一般性地研究非固有点群 G. 既然是非固有点群, 它必定包含非固有转动元素, 同时它也一定包含若干固有转动元素, 因为至少恒元是固有转动元素. 非固有转动变换可看成固有转动变换和空间反演 σ 的乘积, 而 σ 可与任何转动变换对易, 且平方为恒元. 因此, 两个非固有转动元素的乘积是固有转动元素, 非固有转动元素和固有转动元素的乘积则是非固有转动元素, 当然两个固有转动元素的乘积仍是固有转动元素.

群 G 包含的所有固有转动元素的集合 H, 因为满足乘积封闭性, 构成群 G 的子群. 既然两个非固有转动元素的乘积是固有转动元素, G 中所有非固有转动元素只能属于子群 H 的同一个陪集, 因而子群 H 的指数为 2, 它是群 G 的不变子群. 这一性质将帮助我们由固有点群扩充而建立所有的非固有点群.

非固有点群分为两类. 第一类非固有点群包含空间反演变换 σ, 称为 I 型非固有点群, 第二类非固有点群不包含 σ, 称为 P 型非固有点群.

I 型非固有点群 G 中, H 的陪集可表为 σH, 因而群 G 是固有转动元素构成的子群 H 和二阶反演群 V_2 的直乘

$$G = H \otimes \mathrm{V}_2\ , \qquad \mathrm{V}_2 = \{E,\ \sigma\} \tag{2.32}$$

按照晶体理论中常用的熊夫利 (Schoenflies) 符号, 我们已知的固有点群所对应的 I 型非固有点群分别记作

$$\begin{aligned}
&\mathrm{C}_i \approx \mathrm{C}_1 \otimes \mathrm{V}_2, && \mathrm{C}_{(2n)h} \approx \mathrm{C}_{2n} \otimes \mathrm{V}_2\\
&\mathrm{C}_{(2n+1)i} \approx \mathrm{C}_{(2n+1)} \otimes \mathrm{V}_2, && \mathrm{D}_{(2n)h} \approx \mathrm{D}_{2n} \otimes \mathrm{V}_2\\
&\mathrm{D}_{(2n+1)d} \approx \mathrm{D}_{(2n+1)} \otimes \mathrm{V}_2, && \mathrm{T}_h \approx \mathrm{T} \otimes \mathrm{V}_2\\
&\mathrm{O}_h \approx \mathrm{O} \otimes \mathrm{V}_2, && \mathrm{I}_h \approx \mathrm{I} \otimes \mathrm{V}_2
\end{aligned} \tag{2.33}$$

其中, 下标的意义将在本节末做解释.

P 型非固有点群 G 不包含空间反演变换 σ. 设 G 中固有转动元素记作 R_k, 非固有转动元素记作 S_j, 则 σS_j 是固有转动变换, 但与原来的固有转动元素 R_k 不重复. 因为如若 $\sigma S_j = R_k$, 则 $\sigma = R_k S_j^{-1} \in G$, 与假设矛盾. 这样, 由 σS_j 和 R_k 的集合构成新的固有点群 G', 并与原非固有点群 G 同构, 而原来的固有转动元素集合构成的子群 H 仍是群 G' 的指数为 2 的不变子群.

现在我们遇到的是相反的问题: 怎样由固有点群构造 P 型非固有点群? 设固有点群 G' 含有指数为 2 的不变子群, 保持子群元素不变, 把陪集元素都乘以 σ, 就构成 P 型非固有点群 G. 群 G 和群 G' 同构, 它们包含共同的指数为 2 的不变子群.

在我们已知的固有点群中, 挑出那些包含指数为 2 不变子群的固有点群, 构造出的 P 型非固有点群及其不变子群为

$$\begin{aligned}
&\mathrm{S}_{4n} \approx \mathrm{C}_{4n}\ , && 子群\ \ \mathrm{C}_{2n}\ , && \mathrm{C}_{(2n+1)h} \approx \mathrm{C}_{4n+2}\ , && 子群\ \ \mathrm{C}_{2n+1}\\
&\mathrm{C}_s \approx \mathrm{C}_2\ , && 子群\ \ \mathrm{C}_1\ , && \mathrm{C}_{Nv} \approx \mathrm{D}_N\ , && 子群\ \ \mathrm{C}_N\\
&\mathrm{D}_{(2n)d} \approx \mathrm{D}_{4n}\ , && 子群\ \ \mathrm{D}_{2n}\ , && \mathrm{D}_{(2n+1)h} \approx \mathrm{D}_{4n+2}\ , && 子群\ \ \mathrm{D}_{2n+1}\\
&\mathrm{T}_d \approx \mathrm{O}\ , && 子群\ \ \mathrm{T}
\end{aligned} \tag{2.34}$$

最后, 我们介绍一下熊夫利符号体系中下标的含义. 除了 T 群外, 把固有点群中一个次数最高的固有转动轴指向 z 轴正向, 称为主轴. 对 T 群则把一个二次轴指

向 z 轴. 绕 z 轴转动 π 角后再做空间反演, 就是对 xy 平面的反射. 如果一个固有点群包含有绕 z 轴转动 π 角的元素, 则构成的 I 型非固有点群包含对 xy 平面的反射变换. 如果一个固有点群包含有指数为 2 的不变子群, 而陪集里包含有绕 z 轴转动 π 角的元素, 则构成的 P 型非固有点群也包含对 xy 平面的反射变换. 只要非固有点群中包含有对 xy 平面的反射变换, 一律以下标 h (horizontal) 标记. C_2 群对应的 P 型非固有点群虽然包含这样的反射变换, 但记作 C_s, 这是唯一的例外. 在非固有点群不包含对 xy 平面反射变换的条件下, 如果它包含的在 xy 平面的二次转动轴既有固有的也有非固有的, 则用下标 d 标记; 如果它包含的在 xy 平面的二次转动轴都是非固有的, 则用下标 v 标记; 如果它不包含在 xy 平面的二次转动轴, 则记作 S_{4n}(非固有 $4n$ 次轴) 或 C_i 和 $\mathrm{C}_{(2n+1)i}$(包含 σ). 注意, 在 xy 平面的非固有二次转动, 就是对包含 z 轴的平面 (铅垂平面) 的反射变换, 下标 v 就是 "铅垂" 的英文缩写 (vertical). 在用下标 d 标记的非固有点群中, 这样的铅垂平面的位置, 正好平分在 xy 平面内两相邻固有二次转动轴的夹角. 事实上, 如果系统对某铅垂平面的反射保持不变, 而此铅垂平面和 xy 平面的交线又是系统的固有二次转动轴, 则 xy 平面就变成对称平面, 该非固有点群就该用下标 h 标记. 对正二十面体, 可以取 z 轴沿一个二次轴方向, 从而 I 群的 I 型非固有点群记作 I_h.

习　题

1. 设 E 是群 G 的恒元, R 和 S 是群 G 中的任意元素, R^{-1} 和 S^{-1} 分别是 R 和 S 的逆元, 证明 (1) $RR^{-1}=E$; (2) $RE=R$; (3) 若 $TR=R$, 则 $T=E$; (4) 若 $TR=E$, 则 $T=R^{-1}$; (5) (RS) 的逆元为 $S^{-1}R^{-1}$.

2. 证明以乘法作为 "乘积" 的所有正实数构成的群和以 "加法" 作为乘积的所有实数构成的群同构.

3. 设 H_1 和 H_2 是群 G 的两个子群, 证明 H_1 和 H_2 的公共元素的集合也构成群 G 的子群.

4. 证明当群 G 的阶数为 5, 6 或 7 时, 除恒元外, 不可能所有元素的阶数都是 2.

5. 证明除了恒元外, 每个元素的阶都是 2 的群一定是阿贝尔群.

6. 设群 G 的阶数 $g=2n$, n 是大于 2 的素数, 准确到同构, 证明群 G 只有两种: 循环群 C_{2n} 和正 n 边形对称群 D_n.

7. 量子力学中常用的泡利 (Pauli) 矩阵 σ_a 定义如下

$$\sigma_1=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\qquad \sigma_2=\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix},\qquad \sigma_3=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

$$\sigma_a\sigma_b=\delta_{ab}\mathbf{1}+\mathrm{i}\sum_{d=1}^{3}\ \epsilon_{abd}\sigma_d\ ,\qquad \text{如}\ \ \sigma_a^2=\mathbf{1}\ ,\qquad \sigma_1\sigma_2=\mathrm{i}\sigma_3$$

其中, ϵ_{abd} 是三阶完全反对称张量. 证明由 σ_1 和 σ_2 的所有可能乘积和幂次的集合构成群, 列出此群的乘法表, 指出此群的阶数, 各元素的阶数, 群所包含的类和不变子群, 不变子群的商群与什

么群同构. 建立同构关系, 证明此群和正方形固有对称群 D_4 同构.

8. 证明由 $i\sigma_1$ 和 $i\sigma_2$ 的所有可能乘积和幂次的集合构成群, 列出此群的乘法表, 指出此群的阶数, 各元素的阶数, 群包含的各类和不变子群, 不变子群的商群与什么群同构. 说明此群与 D_4 群不同构.

9. 准确到同构, 证明八阶群 G 只有五种: 循环群 C_8, 正方形固有对称群 D_4, 四元数群 Q_8(见第 8 题), 和 I 型非固有点群 $C_{4h}=C_4\otimes V_2$ 与 $D_{2h}=D_2\otimes V_2$.

10. 准确到同构, 证明九阶群 G 只有两种: 循环群 C_9 和直乘群 $C_3\otimes C_3$.

11. 举例说明群 G 的不变子群的不变子群不一定是群 G 的不变子群. 反之, 证明若群 G 的不变子群完整地属于子群 H, 则它也是子群 H 的不变子群.

12. 证明群 G 两个类作为复元素的乘积, 必由若干个整类构成, 即作为乘积的集合, 包含集合中每个元素的共轭元素.

13. 设有限群 G 的阶数为 g, $\mathcal{C}_\alpha$ 是群 G 中的一个类, 含 $n(\alpha)$ 个元素, S_j 和 S_k 是类 $\mathcal{C}_\alpha$ 中任意两个元素 (可以相同), 证明 G 中满足条件 $S_j = PS_kP^{-1}$ 的元素 P 的数目等于 $m(\alpha)=g/n(\alpha)$.

14. 试以 T 群的子群 $C_3=\{E,\ R_1,\ R_1^2\}$ 为基础, 将 C_3 群的乘法表扩充, 计算 T 群的乘法表, 并与表 2.9 做比较.

15. 群 G 由 12 个元素组成, 它的乘法表如下:

	E	A	B	C	D	F	I	J	K	L	M	N
E	E	A	B	C	D	F	I	J	K	L	M	N
A	A	E	F	I	J	B	C	D	M	N	K	L
B	B	F	A	K	L	E	M	N	I	J	C	D
C	C	I	L	A	K	N	E	M	J	F	D	B
D	D	J	K	L	A	M	N	E	F	I	B	C
F	F	B	E	M	N	A	K	L	C	D	I	J
I	I	C	N	E	M	L	A	K	D	B	J	F
J	J	D	M	N	E	K	L	A	B	C	F	I
K	K	M	J	F	I	D	B	C	N	E	L	A
L	L	N	I	J	F	C	D	B	E	M	A	K
M	M	K	D	B	C	J	F	I	L	A	N	E
N	N	L	C	D	B	I	J	F	A	K	E	M

(1) 找出群 G 各元素的逆元; (2) 指出哪些元素可与群中任一元素乘积对易; (3) 列出各元素的周期和阶; (4) 找出群 G 各类包含的元素; (5) 找出群 G 包含哪些不变子群, 列出它们的陪集, 并指出它们的商群与什么群同构; (6) 判断群 G 是否与正四面体对称群 T 或与正六边形对称群 D_6 同构.

第三章　群的线性表示理论

群的线性表示理论是群论能在物理和其他领域得到广泛应用的基础. 我们首先引入群线性表示的定义, 介绍等价表示和不可约表示的概念. 然后, 通过几个基本定理, 掌握群的不等价不可约表示的重要性质. 最后, 就若干个典型例子, 说明寻找有限群所有不等价不可约表示的一般方法, 可约表示的约化方法和群论方法在物理中应用的基本步骤.

3.1　群的线性表示

一、线性表示的定义

从群论观点看, 两个同构的群, 群的性质相同. 由于矩阵群比较容易研究, 如能找到一个矩阵群和给定群同构, 那么, 研究清楚此矩阵群的性质, 也就完全掌握了给定群的性质. 如果矩阵群只是与给定群同态, 那么, 矩阵群只反映给定群的部分性质, 但对研究给定群的性质也有作用. 与给定群同构或同态的矩阵群称为给定群的线性表示.

定义　若行列式不为零的 $m \times m$ 矩阵集合构成的群 $D(G)$ 与给定群 G 同构或同态, 则 $D(G)$ 称为群 G 的一个 m 维线性表示, 简称表示 (representation). 在 $D(G)$ 中, 与 G 中元素 R 对应的矩阵 $D(R)$, 称为元素 R 在表示 $D(G)$ 中的表示矩阵, $D(R)$ 的矩阵迹 $\chi(R) = \mathrm{Tr}\ D(R)$ 称为元素 R 在表示 $D(G)$ 中的特征标 (character).

规定表示矩阵的行列式不为零, 是为了排除表示矩阵与零矩阵直和的平庸情况. 在此规定下, 恒元的表示矩阵是单位矩阵, $D(E) = \mathbf{1}$, 互逆元素的表示矩阵互为逆矩阵, $D(R^{-1}) = D(R)^{-1}$. 若 $D(G)$ 与群 G 同构, 则 $D(G)$ 称为群 G 的真实 (faithful) 表示, 若同态, 则称非真实表示. 非真实表示描写了群 G 关于同态对应核的商群的性质.

让群中所有元素都对应 1, $D(R) = 1$, 得到的表示称为恒等表示, 也称平庸表示. 任何群都有恒等表示. 矩阵群本身是自己的一个表示, 称为自身表示. 表示矩阵都是幺正矩阵的表示称为幺正表示. 表示矩阵都是实正交矩阵的表示称为实正交表示. 如不做特殊说明, 本书只讨论群的有限维表示. 文献 [64] 第四章第 24 题举例说明了无穷维幺正表示的研究方法.

二、群代数和有限群的正则表示

这里讨论任何有限群都有的一个重要的真实线性表示, 称为正则表示. 为此, 我

们先引入群函数和群代数的概念.

所谓函数关系就是自变量和因变量之间的一种确定的对应关系. 过去我们接触的函数, 自变量往往是坐标等连续变量, 它在称为定义域的连续区域内连续变化. 但是作为函数的自变量, 并不一定要是连续变量, 例如说, 以群元素作为自变量也可以建立适当的函数关系.

如果对于群 G 的每一个元素 R, 都有一个确定的数 $F(R)$(实数或复数) 与之对应, 这样的以群元素作为自变量的函数称为群函数, 常记作 $F(G)$. 群函数还可以是矢量函数, 矩阵函数等. 对有限群, 群函数只有 g 个取值, 因此有限群线性无关的群函数数目等于群的阶数 g.

群 G 的每一个线性表示 $D(G)$ 都是群 G 的一个矩阵函数. 表示矩阵的每一个矩阵元素 $D_{\mu\nu}(R)$ 是群 G 的一个群函数. 特征标 $\chi(R)$ 也是一个群函数, 但由于共轭元素的特征标相同

$$D(SRS^{-1}) = D(S)D(R)D(S)^{-1}\ , \qquad \chi(SRS^{-1}) = \chi(R) \tag{3.1}$$

特征标 $\chi(R)$ 实际上是类的函数.

在第一章中我们已复习过线性空间的概念. 线性空间的基可以是线性无关的任何客体. 基的所有实线性组合构成一个实线性空间, 所有复线性组合构成复线性空间, 简称线性空间. 在群的定义中, 我们没有定义过群元素加法的概念. 现在引入群元素的加法. 所谓 $R+S$ 就是把两元素加在一起, 不要问它们加起来等于什么, 只是从原则上规定群元素加法必须满足加法的一些基本公理, 也就是加法的交换律和群元素与数相乘的线性性质

$$\begin{gathered} c_1R + c_2S = c_2S + c_1R\ , \qquad c_1R + c_2R = (c_1+c_2)R\ , \\ c_3\left(c_1R + c_2S\right) = c_3c_1R + c_3c_2S \end{gathered} \tag{3.2}$$

现在我们可以取有限群群元素 R 作为基, 它们的所有复线性组合构成一个线性空间, 称为群空间. 群空间的维数就是群的阶数 g. 群元素的任何线性组合都是群空间的一个矢量, 例如

$$X = \sum_{R\in G} F_1(R)R\ , \qquad Y = \sum_{S\in G} F_2(S)S \tag{3.3}$$

群空间的矢量也要满足线性空间矢量的一般性质, 如数和矢量相乘的线性性质, 两矢量相加减时, 它们的对应分量相加减等. 群空间矢量基的选择也不是唯一的. 以群元素作为基称为自然基. 当基选定后, 群空间的矢量和 $g\times 1$ 列矩阵有一一对应的关系. 当基发生变化, 矢量的列矩阵也按一定的规则做线性组合. 在自然基中, 每一个矢量的分量 $F(R)$ 又是一个群函数. 群空间的矢量和群函数之间也有一一对应的关系.

另一方面, 在线性空间 $\mathcal{L}$ 中只定义了矢量的加减法和矢量与数的乘法, 没有定义矢量间的乘法. 如果在线性空间再引入矢量的乘法, 要求线性空间关于乘法是封闭的, 而且乘法满足分配律, 即对线性空间 $\mathcal{L}$ 中的任何矢量 X, Y 和 Z, 满足

$$XY \in \mathcal{L}\,, \qquad Z\,(X+Y) = ZX + ZY \tag{3.4}$$

这样的线性空间称为代数. 现在我们在群空间中这样定义矢量的乘法: 数与数做普通数的乘法, 群元素与群元素按群元素的乘积规则相乘

$$\begin{aligned} XY &= \left\{\sum_{R\in G} F_1(R)R\right\}\left\{\sum_{S\in G} F_2(S)S\right\} = \sum_{R\in G}\sum_{S\in G}\{F_1(R)F_2(S)\}\,(RS) \\ &= \sum_{T\in G}\left\{\sum_{R\in G} F_1(R)F_2(R^{-1}T)\right\}T = \sum_{T\in G}\left\{\sum_{S\in G} F_1(TS^{-1})F_2(S)\right\}T \end{aligned} \tag{3.5}$$

这样的乘法满足分配律, 而且群空间关于此乘法是封闭的, 从而使群空间变成代数, 称为群代数. 今后我们仍用线性空间的符号 $\mathcal{L}$ 来标记群代数.

在群代数中, 群元素左乘或右乘到群代数的矢量上, 使矢量按一定规则变成群代数中的另一个矢量. 因此, 在群代数中群元素既是矢量又是线性算符. 例如, 把作为算符的 S 左乘到作为矢量基的 R 上, 得到群代数中的一个矢量, 可以写成矢量基的线性组合, 组合系数排列起来构成算符 S 在矢量基 R 中的矩阵形式 $D(S)$

$$SR = T = \sum_{P\in G} P\, D_{PR}(S) \tag{3.6}$$

但是, 按照群元素的乘积规则, S 左乘到 R 上得到另一个群元素 T. 就是说, 式 (3.6) 的求和式实际只有一项, 矩阵 $D(S)$ 的每一列只有一个矩阵元素不为 0, 而为 1

$$D_{PR}(S) = \begin{cases} 1\,, & \text{当 } P = SR \\ 0\,, & \text{当 } P \neq SR \end{cases} \tag{3.7}$$

由于重排定理, $D(S)$ 的每一行也只有一个矩阵元素不为零.

因为矩阵 $D(S)$ 是线性算符 S 在群代数自然基中的矩阵形式, 式 (3.6) 给出 $D(S)$ 和 S 间的一个一一对应的关系. 按惯例, 算符乘积定义为两算符的相继作用, 矩阵按矩阵乘积规则相乘, 则算符的乘积和矩阵的乘积仍按式 (3.6) 一一对应. 这种算符与其矩阵形式一一对应或一多对应的关系在乘积中保持不变的性质, 在群论中经常遇到, 这里我们证明一次, 以后再遇到就不再证明.

$$T(SR) \;=\; \sum_{P\in G} TP\, D_{PR}(S) = \sum_{Q\in G} Q\left\{\sum_{P\in G} D_{QP}(T)D_{PR}(S)\right\}\,,$$

$$(TS)R = \sum_{Q\in G} Q\ D_{QR}(TS) \quad .$$

由于结合律, 两式子的左边相等, 因而

$$D(T)D(S) = D(TS) \longleftrightarrow TS$$

根据第二章定理三, 矩阵 $D(S)$ 的集合构成群 $D(G)$, 且同构于群 G, 称为群 G 的正则表示. 正则表示是真实表示. 每个有限群都有正则表示. 正则表示的维数等于有限群的阶数 g. 由式 (3.7) 知, 除了恒元外, 元素 S 在正则表示中的特征标都为零

$$\chi(S) = \mathrm{Tr}\ D(S) = \begin{cases} g\ , & \text{当}\ S = E \\ 0\ , & \text{当}\ S \neq E \end{cases} \tag{3.8}$$

过去我们习惯于用自然数标记矩阵的行和列, 这不是必要的. 其实只要足以区分行 (列) 的任何指标都可以用来标记矩阵的行 (列). 正则表示是一个典型的例子, 它用群元素来标记矩阵的行 (列). 知道了群的乘法表, 群的正则表示很容易写出来. 元素 S 在正则表示中的矩阵形式由乘法表中第 S 行的乘积元素决定, 表示矩阵第 R 列不为零的矩阵元素所在行, 就是乘法表 S 行中 R 列的乘积元素标记的行. 因此看着乘法表就能立刻写出每个元素的正则表示矩阵. 例如, 正三角形对称群 $\mathrm{D_3}$ 生成元 D 和 A 在正则表示中的表示矩阵如下, 其中行 (列) 用群元素 E, D, F, A, B 和 C 的次序标记

$$D(D) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad D(A) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.9}$$

在群代数中, 作为算符的群元素 S, 不仅可以从左面作用到矢量上, 还可以从右面作用到矢量上. 当然, 对非阿贝尔群来说, 左乘和右乘群元素的结果是不一样的, 而且两个算符的乘积, 对左乘和右乘群元素来说也是不一样的. 例如, 先左乘 S, 再左乘 T, 其结果是左乘 TS, 但先右乘 S, 再右乘 T, 其结果是右乘 ST. 虽然左乘算符的集合和右乘算符的集合, 根据不同的乘积规则可以分别构成群, 分别记作 G 和 $\tilde{G}$, 但如果把它们的相同元素一一对应, 则它们的乘积不再按原规则一一对应. 只有把 G 中元素 R 和 $\tilde{G}$ 中元素 R^{-1} 一一对应, 元素的乘积仍按原规则一一对应. $\tilde{G}$ 称为群 G 的内禀群 (intrinsic group). 为了使右乘算符的矩阵形式的集合也构成原群的线性表示, 可以把算符的矩阵形式取转置, 也就是按列指标求和

$$RS = \sum_{P\in G} \overline{D}_{RP}(S)\ P \tag{3.10}$$

式 (3.10) 给出的群元素 S 和矩阵 $\overline{D}(S)$ 间的一一对应关系, 才能使元素乘积按同一规则一一对应

$$\begin{aligned}(RS)T &= \sum_{P\in G} \overline{D}_{RP}(S)PT = \sum_{Q\in G}\left\{\sum_{P\in G} \overline{D}_{RP}(S)\overline{D}_{PQ}(T)\right\}Q \\ &= R(ST) = \sum_{Q\in G} \overline{D}_{ST}(ST)Q\end{aligned}$$

即 $\overline{D}(ST)=\overline{D}(S)\overline{D}(T)$. 由式 (3.10) 可以计算得表示矩阵 $\overline{D}(S)$

$$\overline{D}_{RP}(S) = \begin{cases} 1, & 当\ P = RS \\ 0, & 当\ P \neq RS \end{cases} \tag{3.11}$$

这个矩阵也用群元素来标记行 (列). 元素 S 在此表示中的矩阵形式由乘法表中第 S 列的乘积元素决定. 表示矩阵第 R 行不为零的矩阵元素所在列, 就是乘法表 S 列中 R 行的乘积元素所标记的列. 例如, 生成元 D 和 A 在此表示中的表示矩阵为

$$\overline{D}(D) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \overline{D}(A) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.12}$$

3.2 标量函数的变换算符

标量的概念是与变换相联系的, 物理中通常说的标量是对三维空间转动变换来说的. 有一些物理量, 例如质量, 温度, 电势等, 它们在转动变换中保持不变, 称为标量. 标量用一个数字就可以把它完全描述. 标量的空间分布称为标量场. 标量场用标量函数 $\psi(x)$ 来描写, 它是空间坐标的函数.

当系统 (标量场) 发生变换 (平移, 转动等) 时, 描写系统的标量函数如何变化? 这里所谓的变换, 可以狭义地理解为系统的平移和转动等空间变换, 也可以广义地理解为更一般的变换, 例如系统内部空间的变换. 为确定起见, 我们姑且把它理解为转动变换. 描写转动通常有两种不同的观点, 一种是本书采用的系统转动的观点, 另一种是坐标系转动的观点, 两种变换互为逆变换.

描写系统状态的坐标可以很多, 例如 N 个粒子系统需用 $3N$ 个坐标来描写. 为书写简单起见, 用一个字母 x 描写系统的全部坐标. 设经过变换 R 后, 在 x 点的场变到 x' 点, 则变换后标量场在 x' 点的值应该等于变换前标量场在 x 点的值. 因此,

变换前后描写系统的标量函数形式必须发生相应的变化, 才能使它们在函数值上有上述的联系. 用标量函数 $\psi(x)$ 和 $\psi'(x)$ 描写变换前后标量场的分布, 则

$$\begin{aligned} &x \xrightarrow{R} x' = Rx \ , \qquad x = R^{-1}x' \\ &\psi(x) \xrightarrow{R} \psi'(x') = \psi(x) \end{aligned} \tag{3.13}$$

用 ψ' 描写变换 R 后的标量场, 从符号上看不清它对变换 R 的依赖. 为了明显地表达出新函数形式与变换 R 的关系, 引入算符 P_R

$$P_R\psi \equiv \psi' \ , \qquad P_R\psi(x') = \psi'(x') \tag{3.14}$$

P_R 是一个算符, 它把变换前的标量函数 ψ 变成新的标量函数 ψ'. 由式 (3.13) 得

$$P_R\psi(x') = \psi(x) = \psi(R^{-1}x')$$

由于自变量要取遍定义域的所有数值, 符号上用 x' 或 x 都是一样的, 故有

$$P_R\psi(x) = \psi(R^{-1}x) \tag{3.15}$$

ψ 和 $P_R\psi$ 是两种不同的函数形式, 式 (3.15) 给出了两个函数在函数值上的联系, 同时也给出了变换算符 P_R 对任意函数 $\psi(x)$ 的作用规则: 只要把原来函数 ψ 的自变量 x 换成 $R^{-1}x$, 再把它看成 x 的函数, 就得到新的函数形式 $P_R\psi$. P_R 显然是线性算符

$$\begin{aligned} P_R\left\{a\psi(x) + b\phi(x)\right\} &= a\psi(R^{-1}x) + b\phi(R^{-1}x) \\ &= aP_R\psi(x) + bP_R\phi(x) \end{aligned} \tag{3.16}$$

式 (3.15) 是标量函数的特征, 所有标量函数都必须满足这一变换规则.

算符 P_R 与变换 R 间有一一对应的关系

$$\begin{aligned} &x \xrightarrow{R} x' = Rx \\ &\psi(x) \xrightarrow{R} \psi'(x') = P_R\psi(x') = \psi(x) \end{aligned}$$

它们的乘积仍按同一规则一一对应

$$\begin{aligned} &x' \xrightarrow{S} x'' = Sx' = (SR)x \\ &\psi'(x') \xrightarrow{S} \psi''(x'') = P_SP_R\psi(x'') = P_S\psi'(x'') = \psi'(x') = \psi(x) \\ &\psi(x) \xrightarrow{SR} P_{SR}\psi(x'') = \psi\left[(SR)^{-1}x''\right] = \psi(x) \end{aligned}$$

因此 $P_SP_R = P_{SR}$. 如果变换 R 的集合构成群 G, 则 P_R 的集合 P_G 构成与 G 同构的群. 有时把群 P_G 称为群 G 的线性实现. 以后, 线性算符群 P_G 和群 G 不再严格区分, 都称为对称变换群.

这里值得强调一下初学者很容易犯的一个错误. 式 (3.15) 是两个函数在函数值上的联系, 这两个函数是不同的. P_R 作用在 ψ 上变成新函数 ψ', 再做 S 变换时, P_S 算符必须作用在 ψ' 上

$$P_S\left[P_R\psi(x)\right] = P_S\psi'(x) = \psi'(S^{-1}x) = P_R\psi(S^{-1}x) = \psi(R^{-1}S^{-1}x)$$

P_S 算符不是作用在 ψ 上

$$P_S\left[P_R\psi(x)\right] \neq P_S\psi(R^{-1}x) = \psi(S^{-1}R^{-1}x)$$

下面通过两个例子来说明如何计算 P_R 算符对标量函数的作用. 第一个例子是系统在一维空间的平移变换

$$x \xrightarrow{T(a)} x' = T(a)x = x + a, \qquad x = T(a)^{-1}x' = x' - a$$

则相应的标量函数平移算符 $P_{T(a)}$ 为

$$P_{T(a)}\psi(x) = \psi[T(a)^{-1}x] = \psi(x-a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-a)^n}{n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\psi(x) = \exp\left\{-a\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right\}\psi(x)$$

$P_{T(a)}$ 可以表达为对 x 微商的指数函数形式.

第二个例子是系统在平面上做转动变换. 建立固定在空间的平面坐标系 K 和固定在系统上的平面坐标系 K'. 随着系统绕 z 轴转动 ω 角, K' 系从与 K 系重合的位置转到图 3.1 中用 x' 和 y' 标记的直角坐标系位置. 系统上的点从 P 位置转到 P' 位置, P 点在 K 系的坐标为 (x,y), P' 点在 K 系的坐标为 (x',y'), 但在 K' 系坐标仍是 (x,y).

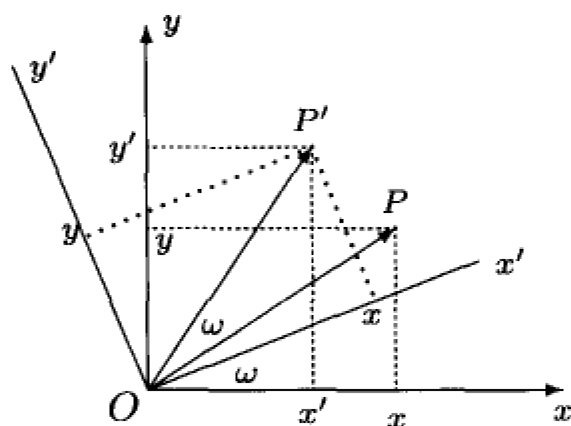


图 3.1　系统绕 z 轴的转动变换

从图中容易看出, 在转动 $R(\omega)$ 作用下, 坐标变换关系为

$$x' = x\cos\omega - y\sin\omega, \qquad y' = x\sin\omega + y\cos\omega \tag{3.17}$$

其逆变换是把 ω 换成 $-\omega$. 关于坐标 x 和 y 的二次齐次多项式构成的函数空间是三维空间, 有三个独立的函数基

$$\psi_1(x,y) = x^2, \qquad \psi_2(x,y) = xy, \qquad \psi_3(x,y) = y^2$$

系统转动 $R(\omega)$ 对应标量函数变换算符 $P_{R(\omega)}$. 这个函数空间对 $P_{R(\omega)}$ 保持不变

$$\begin{aligned} P_{R(\omega)}\psi_1(x,y) &= \psi_1[R^{-1}(x,y)] = (x\cos\omega + y\sin\omega)^2 \\ &= \psi_1(x,y)\cos^2\omega + \psi_2(x,y)\sin(2\omega) + \psi_3(x,y)\sin^2\omega\ , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_{R(\omega)}\psi_2(x,y) &= \psi_2[R^{-1}(x,y)] = (x\cos\omega + y\sin\omega)\,(-x\sin\omega + y\cos\omega) \\
&= -\psi_1(x,y)\sin\omega\cos\omega + \psi_2(x,y)\cos(2\omega) + \psi_3(x,y)\sin\omega\cos\omega\ , \\
P_{R(\omega)}\psi_3(x,y) &= \psi_3[R^{-1}(x,y)] = (-x\sin\omega + y\cos\omega)^2 \\
&= \psi_1(x,y)\sin^2\omega - \psi_2(x,y)\sin(2\omega) + \psi_3(x,y)\cos^2\omega
\end{aligned}$$

即算符 $P_{R(\omega)}$ 在它的这个不变函数空间中可用一个三维矩阵来描写

$$\begin{aligned}
&P_{R(\omega)}\psi_\mu(x,y) = \psi_\mu[R^{-1}(x,y)] = \sum_\nu \psi_\nu(x,y)D_{\nu\mu}[R(\omega)]\ , \\
&D[R(\omega)] = \begin{pmatrix} \cos^2\omega & -\sin\omega\cos\omega & \sin^2\omega \\ \sin(2\omega) & \cos(2\omega) & -\sin(2\omega) \\ \sin^2\omega & \sin\omega\cos\omega & \cos^2\omega \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.18}$$

现在讨论线性算符 $L(x)$ 在变换 R 中的变换规律. 线性算符 $L(x)$ 代表系统状态的一种特定变换, 通过描写系统状态的波函数的变换表现出来. 设此变换使系统从状态 A 变成状态 B, 表现在波函数上, $L(x)$ 作用在函数 $\psi_A(x)$ 上得到函数 $\psi_B(x)$, 即

$$\psi_B(x) = L(x)\psi_A(x)$$

在变换 R 后, 描述两状态的函数形式发生变化

$$\begin{aligned}
\psi_A(x) &\xrightarrow{R} \psi'_A(x') = P_R\psi_A(x') \\
\psi_B(x) &\xrightarrow{R} \psi'_B(x') = P_R\psi_B(x')
\end{aligned}$$

联系此两确定状态的算符形式也必须跟着发生变化, 以确保它仍是这两特定状态之间的变换算符

$$L(x) \xrightarrow{R} L'(x')\ , \qquad \psi'_B(x') = L'(x')\psi'_A(x')$$

这里的变量符号 x' 可用任何其他变量符号来代替, 也可以用 x 来代替

$$L'(x)\left\{P_R\psi_A(x)\right\} = P_R\psi_B(x) = P_R\left\{L(x)\psi_A(x)\right\}$$

因为 $\psi_A(x)$ 是任意函数, 所以

$$L'(x) = P_R L(x) P_R^{-1} \tag{3.19}$$

这个公式也可以做更直接的理解. $L(x)$ 作用在波函数 $\psi(x)$ 上得到新的波函数 $L(x)\psi(x)$, P_R 对这个新波函数的作用为

$$P_R\left[L(x)\psi(x)\right] = \left[P_R L(x) P_R^{-1}\right]\ \left[P_R\psi(x)\right] = L'(x)\psi'(x)$$

在 $L(x)$ 的右面有可能还有波函数, P_R^{-1} 的作用是抵消 P_R 对右面波函数的作用.

在式 (3.19) 中, P_R 是从左面乘, 形式上似乎与线性代数中算符的矩阵形式所做的相似变换 $D'(R) = S^{-1}D(R)S$ 不一样, 但实质是一致的, 因为在线性代数中矢量分量按 S^{-1} 变换

$$\begin{aligned} &\underline{b} = D(R)\underline{a}, && \underline{a}' = S^{-1}\underline{a}, && D'(R) = S^{-1}D(R)S \\ &\psi_B(x) = L(x)\psi_A(x), && \psi'_A(x) = P_R\psi_A(x), && L'(x) = P_R L(x) P_R^{-1} \end{aligned}$$

量子力学中物理量用线性厄米算符来描写, 在变换中按式 (3.19) 变换. 系统哈密顿量 $H(x)$ 也应做此变换

$$H(x) \xrightarrow{R} P_R H(x) P_R^{-1} \tag{3.20}$$

如果 R 是系统的对称变换, 则哈密顿量在变换中保持不变

$$H(x) = P_R H(x) P_R^{-1}\ , \qquad [H(x),\ P_R] = 0 \tag{3.21}$$

即对称变换算符 P_R 与哈密顿量 $H(x)$ 可以对易.

设能级 E 是 m 重简并, 有 m 个线性无关的本征函数

$$H(x)\psi_\mu(x) = E\psi_\mu(x)\ , \qquad \mu = 1,\ 2,\ \cdots,\ m \tag{3.22}$$

$\psi_\mu(x)$ 的所有复线性组合构成一个 m 维线性空间, 在这个空间中的所有函数都是能量为 E 的本征函数, $\psi_\mu(x)$ 是这个空间的一组函数基. 由式 (3.21) 得

$$H(x)\left[P_R\psi_\mu(x)\right] = P_R H(x)\psi_\mu(x) = E\left[P_R\psi_\mu(x)\right] \tag{3.23}$$

哈密顿量的本征函数 $\psi_\mu(x)$ 经 P_R 作用后, 仍是哈密顿量同一能级的本征函数, 仍属此函数空间, 即此 m 维线性空间对 P_R 的作用保持不变, $P_R\psi_\mu(x)$ 可按函数基 $\psi_\nu(x)$ 展开. 把组合系数排成矩阵 $D(R)$, 它就是对称变换算符 P_R 在基 ψ_μ 中的矩阵形式

$$P_R\psi_\mu(x) = \sum_{\nu=1}^{m} \psi_\nu(x) D_{\nu\mu}(R) \tag{3.24}$$

矩阵 $D(R)$ 和算符 P_R 通过式 (3.24) 建立起一一对应或一多对应的关系. 重复式 (3.8) 的证明, 可知它们的乘积也按同一规则对应, 因而矩阵 $D(R)$ 的集合构成群 $D(G)$, 它同构或同态于对称变换群 P_G 和 G

$$D(G) \sim P_G \approx G \tag{3.25}$$

$D(G)$ 是群 G 的一个 m 维线性表示, 它描写了哈密顿量本征函数在对称变换中的变换规律. 这是物理中应用线性表示理论的一个相当普遍的例子. 系统的对称变换

群 G 同构于线性算符群 P_G, 而 P_G 作用在不变函数空间的基上, 得到群 G 的线性表示. 线性表示描写不变函数空间中函数的变换规律. 为了用群论方法研究系统的对称性质, 首先要找到对称变换群的全部线性表示.

注意式 (3.15) 和 (3.24) 的区别. 式 (3.15) 两边的函数宗量是不同的, 它代表变换前后的两个函数在函数值上的联系, 只要是标量函数都应满足式 (3.15) 的变换规则. 而式 (3.24) 两边的函数宗量是相同的, 它代表函数 $P_R\psi_\mu$ 按函数基 ψ_ν 的展开式, 这是函数之间的组合关系. 一般标量函数并不满足此关系, 只有当 ψ_μ 架设的函数空间对算符 P_G 不变时, 才有式 (3.24) 成立.

在量子力学中, 波函数的内积定义为

$$\langle\psi(x)|\phi(x)\rangle = \int \psi(x)^*\phi(x)\mathrm{d}x \tag{3.26}$$

对转动, 平移等空间变换, 由 x 到 $R^{-1}x$ 的雅可比 (Jacobi) 行列式为 1, 则

$$\langle P_R\psi(x)|P_R\phi(x)\rangle = \int\psi(R^{-1}x)^*\phi(R^{-1}x)\mathrm{d}x = \langle\psi(x)|\phi(x)\rangle \tag{3.27}$$

因此, P_R 算符是幺正算符, 在 P_R 变换下厄米算符的厄米性保持不变. 如果取函数基 ψ_μ 是正交归一的, 则线性表示 $D(G)$ 就是幺正表示. 在实际物理问题中有一个重要的例外, 就是洛伦兹 (Lorentz) 变换算符 P_A 不是幺正算符. 这是因为内积定义式 (3.26) 中的坐标积分关于洛伦兹变换的雅可比行列式不为 1. 此时即使把函数基选成正交归一的, 洛伦兹群的线性表示也不是幺正表示.

3.3 等价表示和表示的幺正性

一、等价表示

在具体寻找群的所有线性表示之前, 先要把此问题做适当的简化. 表示是一个矩阵群, 它所作用的线性空间称为表示空间. 在给定的不变函数空间中, 线性变换群 P_G 作用在基 $\psi_\mu(x)$ 上, 得到一个线性表示. 这个线性函数空间就是表示空间. 正则表示的表示空间就是群代数. 对 m 维方矩阵构成的矩阵群, 群元素描写 m 维空间的线性变换, 而这 m 维空间就是矩阵群自身表示的表示空间.

表示空间中基的选择不是唯一的. 当基做线性组合时,

$$\phi_\mu = \sum_\nu \psi_\nu X_{\nu\mu} \tag{3.28}$$

P_R 的矩阵形式做相似变换

$$P_R\psi_\mu = \sum_\rho \psi_\rho D_{\rho\mu}(R)\ , \qquad P_R\phi_\nu = \sum_\lambda \phi_\lambda \overline{D}_{\lambda\nu}(R)\ ,$$

$$\overline{D}(R) = X^{-1}D(R)X \tag{3.29}$$

从而得到一个新的线性表示 $\overline{D}(G)$. 这两个表示的对应表示矩阵 $D(R)$ 和 $\overline{D}(R)$, 是同一个线性变换 P_R 在同一个表示空间中的矩阵形式, 只是因为函数基选择的不同, 使表现形式有所不同, 它们通过同一个相似变换 X 联系起来. 这样两个表示称为等价表示. 从给定的表示, 任选非奇相似变换, 就可得到无穷多个内容上没有实质区别的等价表示.

定义　如果群 G 所有元素 R 在两个表示 $D(G)$ 和 $\overline{D}(G)$ 中的表示矩阵存在同一相似变换关系 (3.29), 这样两个表示称为等价 (equivalent) 表示, 记作 $D(G) \simeq \overline{D}(G)$.

两个等价表示维数相等, 相似变换矩阵 X 也是同维非奇矩阵, 与群元素无关. 等价于同一表示的两表示互相等价. 等价表示没有实质上的区别. 寻找群 G 所有表示的问题简化为寻找群 G 所有不等价的表示问题.

如何来判别两表示是否等价? 任意元素在两个等价表示中的特征标相等

$$\chi(R) = \text{Tr}\ D(R) = \text{Tr}\ \overline{D}(R) = \overline{\chi}(R) \tag{3.30}$$

以后将证明, 对有限群, 每个元素在两表示中的特征标对应相等, 是两表示等价的充要条件. 由于特征标是类的函数, 为了检验两表示的等价性, 只需要在每个类中选一个元素, 检验它们在两表示中的特征标是否相等.

二、表示的幺正性

等价表示没有实质上的区别. 但在一系列等价的表示中, 选什么样的表示作为代表最为方便呢? 下面的定理告诉我们, 对有限群可以选幺正表示作为代表.

定理一　有限群的线性表示等价于幺正表示, 而且两个等价的幺正表示一定可以通过幺正的相似变换相联系.

这个定理的证明见附录 3. 证明过程是对有限群的任意一个给定表示, 具体找出相似变换, 把它化为幺正表示, 然后, 对两个等价的幺正表示, 具体找出幺正的相似变换把它们联系起来. 但是作为一种计算方法, 这方法太繁了, 不实用. 在实际物理问题里, 对有限群和大部分无限群, 算符 P_R 是幺正的, 只要选取正交归一的 (函数) 基, 表示就是幺正的. 物理中重要的例外就是洛伦兹变换群, 它是无限群, 以后会知道, 除恒等表示外, 它根本不存在有限维幺正表示. 定理一的重点在于告诉我们, 有限群的任何表示都存在等价的幺正表示, 而且等价的幺正表示之间, 都存在幺正的相似变换. 这样, 今后对有限群, 我们只需要讨论幺正表示和幺正的相似变换, 以简化计算. 在定理的证明过程中用到了有限群群函数对群元素求平均的概念, 而且这平均值对左乘或右乘群元素 S 保持不变

$$\overline{F} = \frac{1}{g}\sum_{R\in G} F(R) = \frac{1}{g}\sum_{R\in G} F(SR) = \frac{1}{g}\sum_{R\in G} F(RS) \tag{3.31}$$

对无限群, 求和变成无穷级数, 它不一定收敛. 要把这个定理推广到无限群, 关键要把这个对群元素求和的式子推广, 例如定义一个适当的对群元素的积分, 并要证明这样的积分存在, 而且对左乘或右乘群元素 S 保持不变.

如果原先的表示是实矩阵构成的表示, 则定理一的全部证明都可在实数范围内进行. 这样, 定理一可改写成下面的推论.

推论 有限群实表示等价于实正交表示, 两个等价的实正交表示一定可以通过实正交相似变换相联系.

3.4 有限群的不等价不可约表示

本节是表示理论中最重要的一节. 在这一节中, 我们先介绍不可约表示的概念及其基本性质, 然后研究有限群不等价不可约表示的重要性质.

一、不可约表示

定义 如果群 G 表示 $D(G)$ 的每一个表示矩阵 $D(R)$ 都能通过同一个相似变换 X 化成同一形式的阶梯矩阵

$$X^{-1}D(R)X = \begin{pmatrix} D^{(1)}(R) & M(R) \\ 0 & D^{(2)}(R) \end{pmatrix} \tag{3.32}$$

则此表示称为可约表示, 否则称为不可约表示 (irreducible). 容易证明, 式 (3.32) 中两个子矩阵 $D^{(1)}(R)$ 和 $D^{(2)}(R)$ 的集合分别构成群 G 的线性表示. 元素在可约表示中的特征标等于在子表示中的特征标之和

$$\chi(R) = \chi^{(1)}(R) + \chi^{(2)}(R) \tag{3.33}$$

可约表示的定义表明, 可约表示的表示空间存在着非平庸的不变子空间. 反之, 如果表示空间关于表示 $D(G)$ 存在非平庸的不变子空间, 则可选择表示空间的基, 分别属于此不变子空间及其相补的子空间, 在此新基下, 每个表示矩阵 $D(R)$ 就取相同形式的阶梯矩阵. 因此, 表示可约性的一个等价的定义是, 在表示空间中存在非平庸不变子空间的表示称为可约表示, 否则是不可约表示.

如果 $D(G)$ 的表示空间存在两个互补的不变子空间, 可在两个子空间中分别取一组基, 构成整个表示空间的一组完备基, 在这组基下, $D(R)$ 都取同一形式的方块矩阵

$$X^{-1}D(R)X = \begin{pmatrix} D^{(1)}(R) & 0 \\ 0 & D^{(2)}(R) \end{pmatrix} = D^{(1)}(R) \oplus D^{(2)}(R) \tag{3.34}$$

这表示称为完全可约表示, 表示的这种形式称为已约 (reduced) 表示. 有时, 表示空间虽存在非平庸的不变子空间, 但不管如何选择, 它的相补子空间都不是不变的. 这样的表示仍是可约表示, 但称为不能完全约化的可约表示. 在实际物理问题中遇到的不能完全约化的可约表示的典型例子是平移群的如下表示. 一维空间平移变换 $T(a)$ 的集合构成一维平移群 T

$$x \xrightarrow{T(a)} x' = x + a\ , \qquad T(a)T(b) = T(a+b)$$

它是无限阿贝尔群, 存在如下二维不能完全约化的可约表示

$$D(a) = \begin{pmatrix} 1 & a \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad D(a)D(b) = D(a+b) \tag{3.35}$$

对有限群, 表示 $D(G)$ 可取为幺正表示. 如果它的表示空间存在非平庸的不变子空间, 则表示 $D(G)$ 的每一个表示矩阵 $D(R)$ 都可通过同一个幺正相似变换 X, 化为如式 (3.32) 那样的相同形式的幺正的阶梯矩阵 $\overline{D}(R)$. 例如, $D(R)$ 是 P_R 算符在表示空间的矩阵形式, P_R 是幺正算符, 基是正交归一的, 则 $D(R)$ 是幺正的. 若选表示空间的一组新的正交归一基, 它们分属于此不变子空间及其补空间, 则相似变换是幺正的, 变换后的阶梯矩阵 $\overline{D}(R)$ 也是幺正的. 既然 $\overline{D}(R)$ 是幺正的, 它的列矩阵是互相正交归一的 (见附录 1), $D^{(1)}(R)$ 就是幺正矩阵. 同时, $\overline{D}(R)$ 和 $D^{(1)}(R)$ 的行矩阵也分别是正交归一的, 因而 $M(R)$ 只能是零矩阵. 这就是说, 有限群的可约表示一定是完全可约的.

表示 $D(G)$ 的性质完全由两个子表示的性质表达出来. 反过来说, 把若干个不可约表示直和起来, 就构成一个已完全约化的可约表示. 这样的可约表示没有给出任何新的性质: 它的表示空间是若干个不可约表示的表示空间的直和, 空间中的矢量可唯一地分解为分属各子空间的矢量之和, 分别按各不可约表示变换. 因此, 寻找群所有不等价表示的问题进一步简化为寻找群的所有不等价不可约表示的问题.

群论的基本任务就是如何判别表示的等价性和不可约性, 找出给定群的所有不等价不可约表示, 以及如何把可约表示约化为不可约表示的直和.

二、舒尔定理

舒尔 (Schur) 定理是群表示理论中最基本的定理, 它适用于所有的群, 揭示出群的不等价不可约表示的基本特征.

定理二 (舒尔定理二)　设 $D^{(1)}(G)$ 和 $D^{(2)}(G)$ 是群 G 的两个不等价不可约表示, 维数分别为 m_1 和 m_2, X 是一个 $m_1 \times m_2$ 矩阵, 如果对每一个元素 R 都满足

$$D^{(1)}(R)X = XD^{(2)}(R)\ , \qquad \sum_{\rho} D^{(1)}_{\nu\rho}(R)X_{\rho\mu} = \sum_{\rho} X_{\nu\rho}D^{(2)}_{\rho\mu}(R) \tag{3.36}$$

则 $X=0$.

证明 不可约表示的表示空间不存在非平庸的不变子空间. 如果在表示空间中找到低于表示维数的不变子空间, 它必是零空间. 下面对不同情况证明 X 矩阵的列 (或行) 矩阵构成的空间是零空间.

(1) $m_1>m_2$. 把 X 矩阵各列看成列矩阵, 有 m_2 个列矩阵, $(\underline{X_{\cdot\mu}})_\lambda=X_{\lambda\mu}$, 而式 (3.36) 可看成 $D^{(1)}(R)$ 作用在这些列矩阵上, 得到列矩阵的线性组合

$$D^{(1)}(R)\underline{X_{\cdot\mu}}=\sum_\rho \underline{X_{\cdot\rho}}D^{(2)}(R)_{\rho\mu} \tag{3.37}$$

即 m_2 个列矩阵 $\underline{X_{\cdot\mu}}$ 架设了关于 $D^{(1)}(G)$ 不变的子空间, 维数不高于 m_2, 因而它必为零空间.

(2) $m_1=m_2$. 若 $\det X\neq 0$, 则存在逆矩阵 X^{-1}, 式 (3.36) 表明两表示等价, 与假设矛盾. 若 $\det X=0$, 则 X 的列矩阵线性相关, 它只能架设起维数低于 m_1 的子空间. 而式 (3.36) 又说明这子空间对 $D^{(1)}(G)$ 保持不变, 因而只能是零空间.

(3) $m_1<m_2$. 把式 (3.36) 取转置, $D^{(2)}(R)^TX^T=X^TD^{(1)}(R)^T$. 用反证法. 如果 $X^T\neq 0$, 则情况 (1) 的证明表明 $D^{(2)}(R)^T$ 作用的空间存在不变子空间, 取此子空间及其相补子空间的基作为新的基, 把 $D^{(2)}(R)^T$ 化为

$$Y^{-1}D^{(2)}(R)^TY=\begin{pmatrix} D_1(R) & M(R) \\ 0 & D_2(R)\end{pmatrix}$$

上式取转置, 说明 $D^{(2)}(G)$ 的表示空间存在不变子空间, 与假设矛盾. 证完.

推论一 (舒尔定理一) 与不可约表示 $D(G)$ 的所有表示矩阵 $D(R)$ 对易的矩阵必为常数矩阵, 即若 $D(R)X=XD(R)$, 则 $X=\lambda\mathbf{1}$, λ 为常数.

证明 取 X 的任一本征值 λ, 令 $Y=X-\lambda\mathbf{1}$, 则 $\det Y=0$, 且 $D(R)Y=YD(R)$, 按定理二情况 (2) 的证明方法, 可得 $Y=0$, 即 $X=\lambda\mathbf{1}$. 证完.

有限群的可约表示一定是完全可约的, 因而可找到非常数矩阵与所有表示矩阵对易, 故有下面推论.

推论二 有限群表示不可约的充要条件是不可能找到非常数矩阵与所有表示矩阵对易.

三、正交关系

群 G 表示 $D(G)$ 的每一个表示矩阵元素 $D_{\mu\nu}(R)$ 都是群 G 的一个群函数, 把群函数 $D_{\mu\nu}(G)$ 排列成 $g\times 1$ 列矩阵, 对应群空间中以群元素为基的一个矢量. 这里讨论有限群群空间中这些矢量间的正交关系. 群空间两函数 $F_1(G)$ 和 $F_2(G)$ 的内积, 即群空间两矢量的点乘定义为

$$\sum_{R\in G} F_1(R)^*F_2(R)$$

内积为零就是两矢量正交, 同一矢量的点乘称为矢量模的平方.

定理三 有限群 G 的不等价不可约幺正表示 $D^i(G)$ 和 $D^j(G)$ 的矩阵元素, 作为群空间矢量, 满足正交关系

$$\sum_{R\in G} D^i_{\mu\rho}(R)^* D^j_{\nu\lambda}(R) = \frac{g}{m_j}\delta_{ij}\delta_{\mu\nu}\delta_{\rho\lambda} \tag{3.38}$$

其中, g 是群 G 的阶, m_j 是表示 D^j 的维数, 当 $i=j$ 时, $D^i(R)=D^j(R)$.

证明 取 $m_i \times m_j$ 矩阵 $Y(\mu\nu)$, 它只有第 μ 行第 ν 列元素不为零

$$Y(\mu\nu)_{\rho\lambda} = \delta_{\mu\rho}\delta_{\nu\lambda}$$

再定义 $m_i \times m_j$ 矩阵 $X(\mu\nu)$

$$X(\mu\nu) = \sum_{R\in G} D^i(R)^{-1} Y(\mu\nu) D^j(R)$$

$$X(\mu\nu)_{\rho\lambda} = \sum_{R\in G}\sum_{\tau\sigma} D^i_{\rho\tau}(R)^{-1} Y(\mu\nu)_{\tau\sigma} D^j_{\sigma\lambda}(R) = \sum_{R\in G} D^i_{\mu\rho}(R)^* D^j_{\nu\lambda}(R) \tag{3.39}$$

$X(\mu\nu)_{\rho\lambda}$ 正等于式 (3.38) 的左边. 另一方面, $X(\mu\nu)$ 满足

$$X(\mu\nu)D^j(S) = \sum_{R\in G} D^i(S)D^i(RS)^{-1} Y(\mu\nu) D^j(RS) = D^i(S)X(\mu\nu)$$

这里用到群函数关于群元素求和对右乘群元素保持不变的性质.

当 $i\neq j$ 时, 由定理二, $X(\mu\nu)=0$. 当 $i=j$ 时, 由定理二推论一, $X(\mu\nu)_{\rho\lambda} = C(\mu\nu)\delta_{\rho\lambda}$, $C(\mu\nu)$ 是依赖于 $Y(\mu\nu)$ 的常数. 代入式 (3.39), 两边取 $i=j$, $\rho=\lambda$, 并对 λ 求和

$$m_j C(\mu\nu) = \sum_{R\in G}\sum_{\lambda} D^j_{\lambda\mu}(R^{-1}) D^j_{\nu\lambda}(R) = \sum_{R\in G} D^j_{\nu\mu}(RR^{-1}) = g\delta_{\mu\nu}$$

由此得式 (3.38). 证完.

定理三指出, 有限群 G 不等价不可约幺正表示的矩阵元素, 作为群空间的矢量互相正交. 表示做相似变换, 矩阵元素做线性组合. 因此, 可以去掉这幺正性的条件, 只要群 G 的两表示是不等价不可约的, 它们的矩阵元素就是互相正交的. 定理三还指出, 有限群 G 同一不可约幺正表示的 m_j^2 个矩阵元素作为群空间的矢量也互相正交, 且它们的模平方都等于 g/m_j. 这后一个性质必须限制不可约表示是幺正的, 否则相似变换引起的矩阵元素的线性组合会破坏对应群空间矢量的正交性. 要把这一定理推广到无限群去, 关键要解决群函数无穷求和的问题.

正交的矢量必线性无关, 有限群群空间最多有 g 个线性无关的矢量. 现在群 G 每个不等价不可约表示提供 m_j^2 个线性无关的矢量, 这就限制了有限群不等价不可约表示的个数.

推论一 有限群不等价不可约表示维数平方和不大于群的阶数, 即

$$\sum_j m_j^2 \leqslant g \tag{3.40}$$

在式 (3.38) 中取 $\mu = \rho$, $\nu = \lambda$, 并对 μ 和 ν 求和, 得

$$\sum_{R \in G} \chi^i(R)^* \chi^j(R) = g\delta_{ij} \ . \tag{3.41}$$

推论二 有限群不等价不可约表示的特征标, 作为群空间的矢量互相正交.

同类元素的特征标相同. 特征标实际是类的函数. 类似群空间, 可以建立类空间, 不等价不可约表示的特征标提供了类空间线性无关的矢量. 设群 G 有 g_c 个类, 第 α 个类 $\mathcal{C}_\alpha$ 包含 $n(\alpha)$ 个元素. 如果 $R \in \mathcal{C}_\alpha$, 则 $\chi^j(R)$ 可记作 χ_α^j. 将不可约表示的特征标 χ_α^j 乘上因子 $[n(\alpha)/g]^{1/2}$, 看作类空间的矢量, 式 (3.41) 说明这些矢量是正交归一的

$$\sum_{\alpha=1}^{g_c} [n(\alpha)/g]^{1/2} \chi_\alpha^{i*} [n(\alpha)/g]^{1/2} \chi_\alpha^j = \frac{1}{g} \sum_{\alpha=1}^{g_c} n(\alpha) \chi_\alpha^{i*} \chi_\alpha^j = \delta_{ij} \ . \tag{3.42}$$

推论三 有限群不等价不可约表示的个数不能大于群的类数, 即

$$\sum_j 1 \leqslant g_c \ . \tag{3.43}$$

设 $D(G)$ 是群 G 的一个可约表示, 它可以约化为若干个不可约表示 $D^j(G)$ 的直和

$$X^{-1}D(R)X = \bigoplus_j a_j D^j(R) \ , \qquad \chi(R) = \sum_j a_j \chi^j(R) \tag{3.44}$$

其中, $\chi(R)$ 是元素 R 在表示 $D(G)$ 中的特征标. a_j 称为不可约表示 $D^j(G)$ 在表示 $D(G)$ 中的重数. 式 (3.44) 两边乘 $\chi^i(R)^*/g$ 并对 R 求和, 得

$$a_i = \frac{1}{g} \sum_{R \in G} \chi^i(R)^* \chi(R) \tag{3.45}$$

如果找到了群 G 所有不等价不可约表示, 由表示 $D(G)$ 的特征标就可以完全确定在表示 $D(G)$ 中各不可约表示 $D^j(G)$ 的重数 a_j. 如果两个表示约化时各不可约表示的重数 a_j 对应相等, 则两表示等价. 由式 (3.41) 和 (3.44) 有

$$\sum_{R \in G} |\chi(R)|^2 = g \sum_j a_j^2 \geqslant g \tag{3.46}$$

当式 (3.44) 中的表示 $D(G)$ 是不可约表示 $D^i(G)$ 时，得 $a_j=\delta_{ij}$，此时式 (3.46) 变成等号.

推论四 有限群两表示等价的充要条件是每个元素在两表示中的特征标对应相等.

推论五 有限群表示为不可约表示的充要条件是

$$\sum_{R\in G}|\chi(R)|^2=g\ . \tag{3.47}$$

四、表示的完备性

定理三的推论一和推论三只给出有限群不等价不可约表示个数和维数的一个上限，现在来证明那里出现的不等号实际是等号. 证明中利用每个有限群都有的一个特殊的表示，即正则表示. 利用正则表示的特征标计算在正则表示中各不可约表示的重数

$$a_j=\frac{1}{g}\sum_{R\in G}\chi^j(R)^*\chi(R)=\chi^j(E)^*=m_j \tag{3.48}$$

即在正则表示的约化中各不可约表示出现的次数等于该表示的维数

$$X^{-1}D(R)X=\bigoplus_j m_jD^j(R) \tag{3.49}$$

取恒元的特征标

$$g=\chi(E)=\sum_j m_j^2 \tag{3.50}$$

定理四 有限群不等价不可约表示维数平方和等于群的阶数.

推论一 有限群不等价不可约幺正表示的矩阵元素 $D^j_{\mu\nu}(G)$，作为群空间的矢量，构成群空间的正交完备基. 任何群函数 $F(G)$ 都可按它展开

$$\begin{aligned}F(R)&=\sum_{j\mu\nu}C^j_{\mu\nu}D^j_{\mu\nu}(R)\\C^j_{\mu\nu}(R)&=\frac{m_j}{g}\sum_{R\in G}D^j_{\mu\nu}(R)^*F(R)\end{aligned} \tag{3.51}$$

类函数是一种特殊的群函数，对应同类元素它有相同的函数值. 表示的特征标就是类函数. 把任何类函数先按 $D^j_{\mu\nu}(G)$ 展开

$$\begin{aligned}F(R)=F(SRS^{-1})&=\frac{1}{g}\sum_{S\in G}F(SRS^{-1})\\&=\sum_{j\mu\nu}\frac{C^j_{\mu\nu}}{g}\sum_{S\in G}\sum_{\rho\lambda}D^j_{\mu\rho}(S)D^j_{\rho\lambda}(R)D^j_{\nu\lambda}(S)^*\\&=\sum_j\left(\frac{1}{m_j}\sum_\mu C^j_{\mu\mu}\right)\chi^j(R)\end{aligned}$$

既然任何类函数都可以按不等价不可约表示的特征标展开, 可见它们构成类空间的完备基.

推论二 有限群不等价不可约表示的特征标 $\chi^j(G)$ 构成类空间的正交完备基, 任何类函数都可按它们展开

$$\begin{aligned} F(R) &= F(SRS^{-1}) = \sum_j C_j \chi^j(R) \\ C_j &= \frac{1}{g} \sum_{R\in G} \chi^j(R)^* F(R) . \end{aligned} \tag{3.52}$$

推论三 有限群不等价不可约表示的个数等于群的类数, 即

$$\sum_j 1 = g_c . \tag{3.53}$$

把群空间的正交基 $D^j_{\mu\nu}(G)$ 和类空间的正交基 χ^j_α 归一化, 就可得正交归一基, 并用矩阵形式表出

$$U_{R,j\mu\nu} \equiv \left(\frac{m_j}{g}\right)^{1/2} D^j_{\mu\nu}(R) , \qquad V_{\alpha,j} \equiv \left[\frac{n(\alpha)}{g}\right]^{1/2} \chi^j_\alpha \tag{3.54}$$

虽然行列指标比较复杂, 但根据它们可能的取值范围可知, U 是 $g \times g$ 矩阵, V 是 $g_c \times g_c$ 矩阵, 而且等式 (3.38) 和 (3.42) 正说明它们的列矩阵互相正交归一, 即它们都是幺正矩阵. 写出它们的行矩阵正交归一的关系式

$$\begin{gathered} \sum_{j\mu\nu} \left(\frac{m_j}{g}\right)^{1/2} D^j_{\mu\nu}(R) \left(\frac{m_j}{g}\right)^{1/2} D^j_{\mu\nu}(S)^* = \frac{1}{g} \sum_{j\mu\nu} m(j) D^j_{\mu\nu}(R) D^j_{\mu\nu}(S)^* = \delta_{RS} \\ \sum_j \left[\frac{n(\alpha)}{g}\right]^{1/2} \chi^j_\alpha \left[\frac{n(\beta)}{g}\right]^{1/2} \chi^{j*}_\beta = \frac{n(\alpha)}{g} \sum_j \chi^j_\alpha \chi^{j*}_\beta = \delta_{\alpha\beta} \end{gathered} \tag{3.55}$$

这两个公式是群空间的正交基 $D^j_{\mu\nu}(G)$ 和类空间的正交基 χ^j_α 完备性的数学描述. 希望读者熟悉这种指标比较复杂的基的正交性和完备性的数学描述. 这类描述在理论物理中经常遇到.

五、有限群不可约表示的特征标表

群论的主要任务就是对于各种典型的群, 特别是物理中常见的对称变换群, 寻找它们的所有不等价不可约表示, 研究可约表示的约化方法. 对有限群, 首先要找它们的所有不等价不可约表示的特征标, 把特征标列成表, 称为有限群的特征标表. 然后再找不可约表示的表示矩阵. 既然群元素都可以表为生成元的乘积, 找出生成元的表示矩阵也就够了. 选择适当的表象, 使表示矩阵用起来最方便. 这样的表示

称为不可约表示的标准形式. 这里所谓的“最方便”当然与所研究的物理问题有关, 通常希望尽可能多的生成元表示矩阵是对角化的. 对一个非阿贝尔群, 至少在真实表示中, 生成元表示矩阵不可能都是对角化的.

一个有限群 G 的所有不等价不可约表示中, 既有真实表示, 也有非真实表示. 非真实表示同构于群 G 的商群, 而商群的阶数比群 G 的阶数要低, 因而它的不等价不可约表示比较好找. 掌握阶数较低群的所有不等价不可约表示有利于研究较复杂群的不可约表示. 有限群的一维表示基本上都可以通过找商群不可约表示的方法得到, 因而找出有限群的所有不变子群及其商群是分析一个有限群的重要步骤.

有限群不可约表示的特征标必须满足四个等式, 式 (3.50) 和 (3.53) 限制该群不等价不可约表示的个数和维数, 式 (3.42) 和 (3.55) 分别描写特征标表的各行和各列之间特征标的正交归一性. 它们对计算有限群不可约表示的特征标起重要作用, 但是它们只是必要条件, 不是充分条件. 在填写给定群的特征标表时还应注意分析该群本身的特点.

容易证明 (见习题第 1 题), 将一表示的所有表示矩阵都取其复共轭矩阵, 它们的集合也构成原群的表示, 称为原表示的复共轭表示. 互为复共轭的表示, 它们的特征标互为复共轭. 如果互为复共轭的两表示互相等价, 则称为自共轭表示. 自共轭表示的特征标必为实数. 群 G 的两个不可约表示直乘仍是它的一个表示, 特别是当其中有一个表示是一维表示时, 这样的直乘表示仍是不可约的. 用这些方法有助于根据已有不可约表示寻找新的不可约表示.

应该指出, 寻找物理中常见对称群的所有不等价不可约表示和计算直乘表示的约化, 原则上是数学家的任务. 事实上, 常见群不可约表示的特征标表, 表示矩阵的标准形式和不可约表示的直乘表示分解都可以在有关书中查到, 物理工作者的主要任务是把它们应用到具体物理问题中去. 但是实际问题是多种多样的, 要能灵活运用数学家的计算结果, 理解数学家计算的基本思想也是十分重要的. 下面我们就一些比较简单的群, 介绍不可约表示特征标表和表示矩阵的一些计算方法, 希望让读者对群表示理论建立起一些直观的概念.

N 阶循环群 C_N 的标准形式是

$$\mathrm{C}_N = \{E,\ R,\ R^2,\ \cdots,\ R^{N-1}\}\ , \qquad R^N = E \tag{3.56}$$

循环群是阿贝尔群, 群的阶数等于类数, 因而循环群 C_N 的不可约表示都是一维的, 共有 N 个不等价的一维表示. 表示矩阵必须满足群元素的乘积关系, $D^j(R)^N = D^j(E) = 1$, 解得

$$D^j(R) = \exp\{-\mathrm{i}2\pi j/N\}\ , \qquad 0 \leqslant j \leqslant (N-1) \tag{3.57}$$

低阶循环群经常作为有限群的商群出现, 值得特别注意. C_2 群只有两个不等价不

可约表示, 恒等表示记作 D^A, 另一表示称为反对称表示, 记作 D^B. 特征标表见表 3.1. C_3 群有三个不等价不可约表示, 恒等表示记作 D^A, 其他两表示互为复共轭表示, 记作 D^E 和 $D^{E'}$. 特征标表见表 3.2.

表 3.1　C_2 群的特征标表

	E	R
A	1	1
B	1	-1

表 3.2　C_3 群的特征标表

	E	R	R^2
A	1	1	1
E	1	ω	ω^*
E'	1	ω^*	ω

注: $\omega = \exp\{-i2\pi/3\}$

表 3.3　C_4 群的特征标表

	E	R	R^2	R^3
A	1	1	1	1
B	1	-1	1	-1
E	1	$-i$	-1	i
E'	1	i	-1	$-i$

C_4 群中, 元素 E 和 R^2 构成不变子群 C_2, 表示 D^A 和 D^B 是商群 C_4/C_2 的表示. 表示 D^B 和表示 D^E 的直乘就是表示 $D^{E'}$. C_6 群可表为两子群的直乘, $C_6 = C_2 \otimes C_3$, 其中 E 和 R^3 构成子群 C_2, E, R^2 和 R^4 构成子群 C_3. C_6 群的不可约表示可表为两子群不可约表示的直乘. C_2 群的表示记作 $D^A(C_2)$ 和 $D^B(C_2)$, C_3 群的表示记作 $D^A(C_3)$, $D^E(C_3)$ 和 $D^{E'}(C_3)$, C_6 群的元素 R_μ 表为两子群元素的乘积, $R_\mu = S_j T_k$, 则有

$$\begin{aligned}
&D^A(R_\mu) = D^A(S_j)D^A(T_k), && D^B(R_\mu) = D^B(S_j)D^A(T_k), \\
&D^{E_1}(R_\mu) = D^B(S_j)D^E(T_k), && D^{E'_1}(R_\mu) = D^B(S_j)D^{E'}(T_k), \\
&D^{E_2}(R_\mu) = D^A(S_j)D^{E'}(T_k), && D^{E'_2}(R_\mu) = D^A(S_j)D^E(T_k)
\end{aligned} \tag{3.58}$$

表 3.4　C_5 群的特征标表

	E	R	R^2	R^3	R^4
A	1	1	1	1	1
E_1	1	η	η^2	η^3	η^4
E'_1	1	η^4	η^3	η^2	η
E_2	1	η^2	η^4	η	η^3
E'_2	1	η^3	η	η^4	η^2

注: $\eta = \exp\{-i2\pi/5\}$

表 3.5　C_6 群的特征标表

	E	R	R^2	R^3	R^4	R^5
A	1	1	1	1	1	1
B	1	-1	1	-1	1	-1
E_1	1	$-\omega^*$	ω	-1	ω^*	$-\omega$
E'_1	1	$-\omega$	ω^*	-1	ω	$-\omega^*$
E_2	1	ω	ω^*	1	ω	ω^*
E'_2	1	ω^*	ω	1	ω^*	ω

注: $\omega = \exp\{-i2\pi/3\}$

对更复杂的点群, 在点群特征标表中, 各类通常用类中一个代表元素表出. 类中包含的元素数目超过 1 时, 元素数目作为系数写在元素符号的前面. 在晶体理论中, 用符号 C_N 描写循环群, 而用符号 C_N 描写它的生成元. 在写元素符号时, 绕 z 轴方向的转动用不带撇的符号, 绕其他方向的高次轴转动用带一撇的符号, 绕 x 方向的二次轴转动用带一撇的符号, 绕其他方向的二次轴转动用带两撇的符号.

D_2 群包含四个元素, 除恒元外, 其他元素是绕三个互相垂直的二次轴的转动变换, 它们都是二阶元素, 因而可把 D_2 群的三个二次轴转动分别和四阶反演群 V_4 的三个反演变换对应, 显然这两个群同构, 乘法表由表 2.3 的右图给出. D_2 群和 V_4 群的特征标表列于表 3.6. 请注意表 3.6 和 3.3 的区别. 它们都描写四阶群不可约表示的特征标, 都满足特征标的四个必要条件, 但由于群不同构, 它们的特征标表是不同的.

D_3 群是最简单的非阿贝尔群, 包含有六个元素, 恒元 E, 两个三次轴转动 D 和 F, 三个二次轴转动 A, B 和 C, 分别构成三类, 都是自逆类, 乘法表如表 2.5 所示. 用晶体理论的符号, 三次轴转动 D 表为 C_3, 二次轴转动 A 表为 C_2'. 因为 $1^2+1^2+2^2=6$, 所以 D_3 群有两个一维表示 D^A, D^B 和一个二维不可约表示 D^E. 不变子群 $\{E, D, F\}$ 的商群同构于 C_2 群, 由此得 D_3 群的两个一维表示. 二维表示的特征标可用多种方法计算. 由式 (3.55) 可算出 $\chi^E(C_2')=0$, 再由式 (3.42) 算得 $\chi^E(C_3)=-1$. $\chi^E(C_2')$ 等于零也可由下面分析得到：如果 $\chi^E(C_2')$ 不等于零, 则 $D^B\times D^E$ 就是与 D^E 不等价的二维不可约表示, 与上面结论矛盾. 还有可用坐标变换的方法写出元素的变换矩阵, 如式 (2.10) 所示. 这就是 D_3 群的一组二维不可约表示, 在这表示中, 一个生成元 A 的表示矩阵是对角矩阵, 另一个不是. 取矩阵迹就得特征标 (见表 3.7).

表 3.6　D_2 群的特征标表

D_2	E	C_2	C_2'	C_2''
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	-1	1
B_2	1	-1	1	-1

表 3.7　D_3 群的特征标表

D_3	E	$2C_3$	$3C_2'$
A	1	1	1
B	1	1	-1
E	2	-1	0

C_{2n+1} 群和 C_{2n+2} 群各有 $2n$ 个非自逆类, 也各有 $2n$ 个不等价不可约的非自共轭表示. D_2 群和 D_3 群所有类都是自逆类, 所有不可约表示都是实表示. 一般说来 (习题第 8 题证明), 有限群包含的非自逆类个数等于它的不等价不可约的非自共轭表示的个数.

六、T 群的特征标表

T 群有 12 个元素, 四个类, 其中两个是自逆类, 由 $1^2+1^2+1^2+3^2=12$ 知它有三个一维和一个三维不等价不可约表示. 由恒元和三个二次轴转动元素构成 T 群的一个不变子群 D_2, 它的指数为 3, 商群同构于 C_3 群. 商群给出了 T 群三个不等价的一维表示, 其中两个表示是非自共轭表示. 因为只有一个三维不等价的不可约表示 D^T, 所以三次轴转动的类在表示 D^T 中的特征标为零, 这也符合条件 (3.55). 再根据特征标的正交性 (3.42) 定出余下的特征标值. T 群的特征标表列于表 3.8.

表 3.8 T群的特征标表

T	E	$3C_2$	$4C_3'$	$4C_3'^2$
A	1	1	1	1
E	1	1	ω	ω^2
E'	1	1	ω^2	ω
T	3	-1	0	0

注: $\omega = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi/3}$

T 群的三维不可约表示的表示矩阵可用计算坐标变换矩阵的方法 [类似式 (2.9)] 定出. 因为绕 z 轴转动 π 角的变换 T_z^2 使 x 和 y 轴反向, 三次轴转动 R_1 使 x, y 和 z 轴轮换, 所以在表示 D^T 中这两个生成元的表示矩阵为

$$D^T(T_z^2) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad D^T(R_1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.59}$$

有时取表象使 R_1 的表示矩阵对角化. 作为练习, 请读者计算在那个表象中的表示矩阵, 以及两种表象间的相似变换.

七、O 群的特征标表

O 群有 24 个元素, 五个自逆类, 由 $1^2+1^2+2^2+3^2+3^2=24$ 知它有两个一维, 一个二维和两个三维不等价不可约的自共轭表示. O 群有两个不变子群, 子群 T 的指数为 2, 商群与 C_2 群同构, 它给出了 O 群两个一维表示 D^A 和 D^B. 另一个不变子群 D_2, 指数为 6, 商群同构于 D_3 群, 它给出 O 群二维表示 D^E 的特征标和表示矩阵 [见表 3.9 和习题第 10 题, 请读者自行计算和检验, 注意利用式 (2.10)]

$$D^E(T_z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad D^E(R_1) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix} \tag{3.60}$$

表 3.9 O群的特征标表

O	E	$3C_4^2$	$8C_3'$	$6C_4$	$6C_2''$
A	1	1	1	1	1
B	1	1	1	-1	-1
E	2	2	-1	0	0
T_1	3	-1	0	1	-1
T_2	3	-1	0	-1	1

O 群的一个三维不可约表示 D^{T_1} 的表示矩阵可用计算坐标变换矩阵的方法 [见式 (3.59)] 定出. 因为绕 z 轴转动 $\pi/2$ 角的变换 T_z 把 x 轴转到 y 轴方向, y 轴转到

负 x 轴方向, 三次轴转动 R_1 已在前面讨论过, 所以在这三维表示中有

$$D^{T_1}(T_z) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad D^{T_1}(R_1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.61}$$

三维表示和反对称表示 D^B 相乘, 就得到另一个三维不等价不可约表示 D^{T_2}

$$D^{T_2}(T_z) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad D^{T_2}(R_1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.62}$$

在这个表象中, 三维表示的两个生成元都不是对角化的, 而 T_z^2 的表示矩阵是对角化的. 在计算可约表示约化问题中, 除了生成元外, 常同时考虑 T_z^2 表示矩阵的约化, 以方便计算. 与 T 群一样, 有时也采用 R_1 的表示矩阵对角化的表象. 两种表象间的相似变换与 T 群情况相同, 现在还需要再计算生成元 T_z 的表示矩阵.

* 八、自共轭表示和实表示

我们说过, 表示矩阵都是实矩阵的表示称为实表示. 既然等价表示的本质是一样的, 我们可以把实表示的定义扩充, 等价于实表示的表示也称为实表示. 实表示当然是自共轭表示. 自共轭表示虽然与其复共轭表示等价, 但不一定存在相似变换使所有表示矩阵都变成实矩阵, 因而不一定是实表示. 下面的定理给出判别自共轭表示是不是实表示的方法. 非自共轭表示很容易区别, 就是此表示中至少有一个元素的特征标不是实数, 而是复数.

定理五 有限群幺正的不可约自共轭表示与其复共轭表示间的相似变换矩阵只能是对称或反对称的, 这个相似变换矩阵对实表示是对称的, 而对非实表示是反对称的.

证明 对有限群幺正的不可约自共轭表示, 存在幺正的相似变换 X, 使

$$X^{-1}D(R)X = D(R)^* \tag{3.63}$$

上式取复共轭

$$D(R) = X^T D(R)^* X^* = \left(X^T X^{-1}\right) D(R) \left(X X^*\right)$$

由舒尔定理知, $X^T X^{-1} = \tau \mathbf{1}$, $X^T = \tau X$, $X = \tau X^T = \tau^2 X$, 即 $\tau = \pm 1$, X 矩阵必是对称或反对称矩阵.

现在要证明, 实表示的充要条件是 X 为对称矩阵, $\tau = 1$. 先设法把 τ 和特征标联系起来, 以证明等价的表示有相同的 τ.

$$\begin{aligned}
\sum_{R\in G} \chi(R^2) &= \sum_{\mu\nu} \sum_{R\in G} \{D_{\mu\nu}(R)^*\}^* D_{\nu\mu}(R) \\
&= \sum_{\mu\nu} \sum_{R\in G} \left\{X^{-1}D(R)X\right\}^*_{\mu\nu} D_{\nu\mu}(R) \\
&= \sum_{\mu\nu\rho\lambda} \tau \sum_{R\in G} X_{\mu\rho} D_{\rho\lambda}(R)^* \left(X^{-1}\right)_{\nu\lambda} D_{\nu\mu}(R) \\
&= \frac{g\tau}{m} \sum_{\mu\nu} X_{\mu\nu} \left(X^{-1}\right)_{\nu\mu} = g\tau
\end{aligned}$$

如果 $D(G)$ 是非自共轭表示, 由正交定理, 上式第一行就等于零.

既然等价的表示有相同的 τ, 当 $D(G)$ 是实表示时, 可取 $D(R)$ 是实矩阵, 故 $\tau = 1$. 反之, 如果 X 是对称的幺正矩阵, $X^* = X^{-1}$, 若能证明 X 能表成另一个对称的幺正矩阵 Y 的平方, $X = Y^2$, 则代入式 (3.63), 可知 $D(R)$ 通过相似变换 Y 变成实矩阵

$$Y^{-1}D(R)Y = YD(R)^*Y^{-1} = \left(Y^{-1}D(R)Y\right)^*$$

任取 X 的本征值 λ 和本征列矩阵 $\underline{a}$, $X\underline{a} = \lambda\underline{a}$, $\lambda^* = \lambda^{-1}$. 取复共轭

$$X^{-1}\underline{a}^* = \lambda^{-1}\underline{a}^* \ , \qquad X\underline{a}^* = \lambda\underline{a}^*$$

即 $\underline{a}$ 的实部和虚部分别都是 X 同一本征值的本征列矩阵. 因此, X 的本征列矩阵都可取成实的, X 可通过实正交相似变换 M 对角化. 又因对角元模为 1, 它可分解为另一模为 1 的复数的平方, 故有

$$M^{-1}XM = \Gamma^2 \ , \qquad Y = M\Gamma M^{-1} \ , \qquad Y^{-1} = M\Gamma^* M^{-1} = Y^*$$

Y 是对称幺正矩阵, 且 $Y^2 = X$. 证完.

推论 有限群不可约表示特征标满足

$$\frac{1}{g}\sum_{R\in G} \chi(R^2) = \begin{cases} 1, & \text{实表示} \\ -1, & \text{自共轭而非实表示} \\ 0, & \text{非自共轭表示}. \end{cases} \qquad (3.64)$$

*3.5 分导表示和诱导表示

一、分导表示和诱导表示

设群 G 的阶为 g, 它的类 $\mathcal{C}_\alpha$ 中包含 $n(\alpha)$ 个元素, 它的不可约表示记作 $D^j(G)$, 维数为 m_j, 类 $\mathcal{C}_\alpha$ 中元素 S 在此表示的特征标为 $\chi^j(S)$ 或 χ^j_α. 又设 $H = \{T_1 =$

$E, T_2, \cdots, T_h\}$ 是群 G 的子群, 阶为 h, 指数为 $n = g/h$, 左陪集记作 $R_r H$, $2 \leqslant r \leqslant n$. 补上 $R_1 = E$, 则群 G 任意元素可表为 $R_r T_t$. 虽然 R_r 的选取不是唯一的, 但我们假定 R_r 已经选定了. 子群 H 的类 $\overline{\mathcal{C}}_\beta$ 中包含 $\overline{n}(\beta)$ 个元素, H 的不可约表示记作 $\overline{D}^k(H)$, 维数为 $\overline{m}_k$, 类 $\overline{\mathcal{C}}_\beta$ 中元素 T_t 在此表示的特征标为 $\overline{\chi}^k(T_t)$ 或 $\overline{\chi}^k_\beta$.

把群 G 不可约表示 $D^j(G)$ 中与子群 H 元素有关的表示矩阵 $D^j(T_t)$ 挑出来, 构成子群 H 的一个表示, 称为群 G 表示 $D^j(G)$ 关于子群 H 的分导表示, 记作 $D^j(H)$. 分导表示一般是可约表示, 可按子群的不可约表示 $\overline{D}^k(H)$ 分解

$$\begin{aligned} &X^{-1} D^j(T_t) X = \bigoplus_k a_{jk} \overline{D}^k(T_t), \qquad m_j = \sum_k a_{jk} \overline{m}_k \\ &a_{jk} = \frac{1}{h} \sum_{T_t \in H} \overline{\chi}^k(T_t)^* \chi^j(T_t) = \frac{1}{h} \sum_\beta \overline{n}(\beta) \left(\overline{\chi}^k_\beta\right)^* \chi^j_\beta \end{aligned} \tag{3.65}$$

仍采用上面的符号. 设 $\overline{D}^k(H)$ 表示空间的基为 ψ_μ

$$P_{T_t} \psi_\mu = \sum_\nu \psi_\nu \overline{D}^k_{\nu\mu}(T_t)$$

定义 $\psi_{r\mu} = P_{R_r} \psi_\mu$, 其中 $\psi_{1\mu} = \psi_\mu$. 由 $n\overline{m}_k$ 个基 $\psi_{r\mu}$ 架设的空间对群 G 保持不变, 对应群 G 的一个 $n\overline{m}_k$ 维表示 $\Delta^k(G)$. 表示矩阵可以用下面的方法计算. 对群 G 任意元素 S, 逐个取 r, 计算 SR_r. SR_r 必可表为 $R_u T_t$ 形式, 其中 u 和 t 完全由 S 和 r 决定. 由于

$$P_S \psi_{r\mu} = P_{SR_r} \psi_\mu = P_{R_u} P_{T_t} \psi_\mu = \sum_\nu \psi_{u\nu} \overline{D}^k_{\nu\mu}(T_t)$$

得

$$\Delta^k_{u\nu, r\mu}(S) = \overline{D}^k_{\nu\mu}(T_t), \qquad \chi^k(S) = \mathrm{Tr}\ \Delta^k(S) \tag{3.66}$$

这表示 $\Delta^k(G)$ 称为子群 H 表示 $d^k(H)$ 关于群 G 的诱导表示. 诱导表示一般是可约表示, 可按群 G 的不可约表示 $D^j(G)$ 分解

$$\begin{aligned} &Y^{-1} \Delta^k(S) Y = \bigoplus_j b_{jk} D^j(S), \qquad (g/h) m_k = \sum_j b_{jk} m_j \\ &b_{jk} = \frac{1}{g} \sum_{S \in G} \chi^j(S)^* \chi^k(S) = \frac{1}{g} \sum_\alpha n(\alpha) \left(\chi^j_\alpha\right)^* \chi^k_\alpha \end{aligned} \tag{3.67}$$

其中, 设元素 S 属类 $\mathcal{C}_\alpha$, 在表示 $\Delta^k(G)$ 中的特征标为 $\chi^k(S) = \chi^k_\alpha$. 与 S 共轭的元素, 即类 $\mathcal{C}_\alpha$ 中包含的元素, 可能有些在子群 H 中, 有些不在子群中. 在子群中的元素构成子群 H 的若干个完整的类 $\overline{\mathcal{C}}_\beta$. 这样的类 $\overline{\mathcal{C}}_\beta$ 可能有几个, 也可能零个. 后者说明与 S 共轭的元素都不属于子群 H. 群 G 中不同的类 $\mathcal{C}_\alpha$ 所对应的子群 H 的类 $\overline{\mathcal{C}}_\beta$ 不会重复.

由式 (3.66) 知, 只有当 $r = u$ 时, 即 $SR_r = R_rT_t$ 时才会出现表示矩阵 $\Delta^k(S)$ 的对角元, 从而对特征标 $\chi^k(S) = \chi^k_\alpha$ 有贡献, 就是说, 只有当类 $\mathcal{C}_\alpha$ 中包含属子群 H 的元素时才会有不等于零的特征标 $\chi^k(S)$. 设满足 $R_r^{-1}SR_r \in \overline{\mathcal{C}}_\beta$ 的不相同的 R_r 个数为 K_β, 则 $\chi^k_\alpha = \sum_\beta\ K_\beta \overline{\chi}^k_\beta$.

根据第二章第 13 题, 群 G 中满足 $SR = RT_t$ 的元素 R 的数目为 $m(\alpha) = g/n(\alpha)$, 这样的元素 R 一般可表为 R_rT_x 的形式, 故有 $R_r^{-1}SR_r = T_xT_tT_x^{-1} \in \overline{\mathcal{C}}_\beta$. 另一方面, 在子群 H 中满足 $T_yT_tT_y^{-1} = T_t$ 的元素 T_y 的数目为 $\overline{m}(\beta) = h/\overline{n}(\beta)$. 若 R_rT_x 满足 $S(R_rT_x) = (R_rT_x)T_t$, 则 $R_rT_xT_y$ 也满足此式, 但并不产生对 K_β 新的贡献, 因为 $R_r^{-1}SR_r = T_xT_yT_tT_y^{-1}T_x^{-1} = T_xT_tT_x^{-1}$. 因此

$$K_\beta = \frac{m(\alpha)}{\overline{m}(\beta)} = \frac{g\overline{n}(\beta)}{hn(\alpha)}, \qquad \chi^k_\alpha = \frac{g}{hn(\alpha)}\sum_\beta\ \overline{n}(\beta)\overline{\chi}^k_\beta \tag{3.68}$$

由式 (3.68) 很容易证明式 (3.65) 和 (3.67) 中的两个重数 a_{jk} 和 b_{jk} 相等

$$b_{jk} = \frac{1}{g}\sum_\alpha\ n(\alpha)\left(\chi^j_\alpha\right)^*\chi^k_\alpha = \frac{1}{h}\sum_\beta\ \overline{n}(\beta)\left(\chi^j_\beta\right)^*\overline{\chi}^k_\beta = a_{jk} \tag{3.69}$$

计算中用到群 G 的类 $\mathcal{C}_\alpha$ 包含子群 H 若干个完整的类 $\overline{\mathcal{C}}_\beta$, $\chi^j_\alpha = \chi^j_\beta$, 而且不同的类 $\mathcal{C}_\alpha$ 所包含的子群 H 的类 $\overline{\mathcal{C}}_\beta$ 不会重复. 类 $\mathcal{C}_\alpha$ 中包含的不属于子群的元素对 χ^k_α 没有贡献. 这样, 上式中对类 α 求和也就等价于对子群的所有类 $\overline{\mathcal{C}}_\beta$ 求和. 式 (3.69) 称为费罗宾尼斯 (Frobenius) 定理.

二、D_{2n+1} 群的不可约表示

D_{2n+1} 群包含一个 $2n+1$ 次轴, 称为主轴, 生成元记作 C_{2n+1}, 垂直主轴的平面内均匀分布着 $2n+1$ 个等价的二次轴, 代表元素记作 C_2'. 因此 D_{2n+1} 群包含 $g = 4n+2$ 个元素, $g_c = n+2$ 个自逆类 [见式 (2.19)], 由式 (3.50) 和 (3.53) 知, D_{2n+1} 群有两个一维和 n 个二维不等价不可约表示, 所有不可约表示都是自共轭表示, 特征标都是实数. D_{2n+1} 群的生成元可取为 C_{2n+1} 和 C_2'.

D_{2n+1} 群有一个指数为 2 的不变子群 C_{2n+1}, 陪集由所有垂直主轴的二次轴转动组成, 商群是二阶群, 它给出 D_{2n+1} 群的两个一维不等价表示, 分别记作 D^A 和 D^B

$$D^A(C_{2n+1}) = D^B(C_{2n+1}) = D^A(C_2') = 1, \qquad D^B(C_2') = -1 \tag{3.70}$$

不变子群 C_{2n+1} 是阿贝尔群, 有 $2n+1$ 个不等价的一维表示, 基分别记作 ψ^j, $0 \leqslant j \leqslant 2n$, 满足

$$C_{2n+1}\psi^j = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2j\pi/(2n+1)}\psi^j$$

研究这些表示关于 D_{2n+1} 群的诱导表示. 扩充表示空间, 定义另一组基 $\phi^j = C_2'\psi^j$. 利用公式 $C_{2n+1}C_2' = C_2'C_{2n+1}^{-1}$, 有

$$C_2'\psi^j = \phi^j, \qquad C_2'\phi^j = \psi^j, \qquad C_{2n+1}\phi^j = e^{i2j\pi/(2n+1)}\phi^j$$

由此得 D_{2n+1} 群的二维表示, 记作 D^{E_j}

$$D^{E_j}(C_{2n+1}) = \begin{pmatrix} e^{-i2j\pi/(2n+1)} & 0 \\ 0 & e^{i2j\pi/(2n+1)} \end{pmatrix}, \qquad D^{E_j}(C_2') = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\chi^j(C_{2n+1}^m) = 2\cos[2jm\pi/(2n+1)], \qquad \chi^j(C_2') = 0 \tag{3.71}$$

很明显, 其中有些表示是等价的, 有些表示是可约的

$$\begin{gathered} \sigma_1^{-1} D^{E_{2n+1-j}}(R)\sigma_1 = D^{E_j}(R), \\ X^{-1}D^{E_0}(R)X = \begin{pmatrix} D^A(R) & 0 \\ 0 & D^B(R) \end{pmatrix}, \qquad X = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix} \end{gathered} \tag{3.72}$$

其中, σ_1 是泡利矩阵. 就是说, 只有 n 个表示 D^{E_j}, $1 \leqslant j \leqslant n$ 是 D_{2n+1} 群的二维不等价不可约表示. 这些二维表示可通过相似变换 X 表为另一种常用形式

$$\overline{D}^{E_j}(C_{2n+1}) = \begin{pmatrix} \cos\left(\dfrac{2j\pi}{2n+1}\right) & -\sin\left(\dfrac{2j\pi}{2n+1}\right) \\ \sin\left(\dfrac{2j\pi}{2n+1}\right) & \cos\left(\dfrac{2j\pi}{2n+1}\right) \end{pmatrix}, \qquad \overline{D}^{E_j}(C_2') = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3.73}$$

D_3 群的特征标表已列于表 3.7. D_5 和 D_7 群的特征标表列于表 3.10 和表 3.11.

表 3.10 D_5 群的特征标表

D_5	E	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2'$
A	1	1	1	1
B	1	1	1	-1
E_1	2	p	$-p^{-1}$	0
E_2	2	$-p^{-1}$	p	0

注: $p = 2\cos(2\pi/5) = (\sqrt{5}-1)/2$, $p^{-1} = -2\cos(4\pi/5) = (\sqrt{5}+1)/2$

表 3.11 D_7 群的特征标表

D_7	E	$2C_7$	$2C_7^2$	$2C_7^3$	$7C_2'$
A	1	1	1	1	1
B	1	1	1	1	-1
E_1	2	q_1	q_2	q_3	0
E_2	2	q_2	q_3	q_1	0
E_3	2	q_3	q_1	q_2	0

注: $\lambda = e^{-i2\pi/7}$, $q_1 = \lambda + \lambda^6$, $q_2 = \lambda^2 + \lambda^5$, $q_3 = \lambda^3 + \lambda^4$

三、D_{2n} 群的不可约表示

D_{2n} 群包含一个 $2n$ 次轴, 称为主轴, 生成元记作 C_{2n}, 垂直主轴的平面内均匀分布有 $2n$ 个二次轴, 分成两组, 分别互相等价, 构成两个类, 代表元素为 C_2' 和

$C_2'' = C_{2n}C_2' = C_2'C_{2n}^{-1}$. 因此 D_{2n} 群的阶 $g = 4n$, 类数 $g_c = n+3$, 所有的类都是自逆类 [见式 (2.20)]. 由式 (3.50) 和 (3.53) 知, D_{2n} 群有四个一维和 $n-1$ 个二维不等价不可约表示, 所有不可约表示都是自共轭表示, 特征标都是实数. D_{2n} 群的生成元可取为 C_{2n} 和 C_2'.

D_{2n} 群有三个指数为 2 的不变子群, 它们的商群表示给出了 D_{2n} 群四个不等价的一维表示. 一个不变子群是由绕主轴转动元素构成的 C_{2n} 群, 陪集由所有垂直主轴的二次轴转动组成, 商群是二阶群, 给出 D_{2n} 群的两个一维不等价不可约表示记作 D^{A_1} 和 D^{A_2}

$$D^{A_1}(C_{2n}) = D^{A_2}(C_{2n}) = D^{A_1}(C_2') = 1, \qquad D^{A_2}(C_2') = -1 \tag{3.74}$$

另两个是由绕主轴转动 C_{2n} 的偶次幂, 加上垂直主轴平面中的一组二次轴转动 (类 C_2' 或类 C_2'') 组成的 D_n 群. C_{2n} 的奇次幂和另一组二次轴转动构成陪集, 由它们商群的反对称表示得到 D_{2n} 群的另两个不等价的一维表示, 分别记作 D^{B_1} 和 D^{B_2}

$$D^{B_1}(C_{2n}) = D^{B_2}(C_{2n}) = D^{B_2}(C_2') = -1, \qquad D^{B_1}(C_2') = 1 \tag{3.75}$$

不变子群 C_{2n} 是阿贝尔群, 有 $2n$ 个不等价的一维表示, 基分别记作 ψ^j, $0 \leqslant j \leqslant 2n-1$, 满足

$$C_{2n}\psi^j = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}j\pi/n}\psi^j$$

研究这些表示关于 D_{2n} 群的诱导表示. 扩充表示空间, 定义另一组基 $\phi^j = C_2'\psi^j$. 利用公式 $C_{2n}C_2' = C_2'C_{2n}^{-1}$, 有

$$C_2'\psi^j = \phi^j, \qquad C_2'\phi^j = \psi^j, \qquad C_{2n}\phi^j = \mathrm{e}^{\mathrm{i}j\pi/n}\phi^j$$

由此得 D_{2n} 群的二维表示, 记作 D^{E_j}

$$\begin{gathered} D^{E_j}(C_{2n+1}) = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}j\pi/n} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}j\pi/n} \end{pmatrix}, \qquad D^{E_j}(C_2') = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \chi^j(C_{2n}^m) = 2\cos(jm\pi/n), \qquad \chi^j(C_2') = \chi^j(C_2'') = 0 \end{gathered} \tag{3.76}$$

其中, 有些表示是等价的, 有些表示是可约的

$$\begin{aligned} &\sigma_1^{-1}D^{E_{2n-j}}\sigma_1 = D^{E_j}, && X = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -\mathrm{i} \\ 1 & \mathrm{i} \end{pmatrix}, \\ &X^{-1}D^{E_0}X = \begin{pmatrix} D^{A_1} & 0 \\ 0 & D^{A_2} \end{pmatrix}, && X^{-1}D^{E_n}X = \begin{pmatrix} D^{B_1} & 0 \\ 0 & D^{B_2} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{3.77}$$

就是说, 只有 $n-1$ 个表示 $D^{E_j}, 1 \leqslant j \leqslant n-1$ 是 D_{2n} 群的二维不等价不可约表示. 这些二维表示可通过相似变换 X 表为另一种常用形式

$$\overline{D}^{E_j}(C_{2n+1}) = \begin{pmatrix} \cos(j\pi/n) & -\sin(j\pi/n) \\ \sin(j\pi/n) & \cos(j\pi/n) \end{pmatrix}, \qquad \overline{D}^{E_j}(C_2') = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3.78}$$

D_2 群的特征标表已列于表 3.6. D_4 和 D_6 群的特征标表列于表 3.12 和表 3.13.

表 3.12　D_4 群的特征标表

D_4	E	$2C_4$	C_4^2	$2C_2'$	$2C_2''$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	1	-1
B_2	1	-1	1	-1	1
E_1	2	0	-2	0	0

表 3.13　D_6 群的特征标表

D_6	E	$2C_6$	$2C_6^2$	C_6^3	$3C_2'$	$3C_2''$
A_1	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	1	-1	-1	1
E_1	2	1	-1	-2	0	0
E_2	2	-1	-1	2	0	0

对 D_{4n+2} 群, 绕主轴转动 π 角的元素 C_{4n+2}^{2n+1} 不属于子群 D_{2n+1}, 它可以和群中所有元素对易. 因此, D_{4n+2} 群分解为两个子群的直乘

$$D_{4n+2} = D_{2n+1} \otimes C_2 \ , \qquad C_2 = \{E, C_{4n+2}^{2n+1}\} \tag{3.79}$$

D_{4n+2} 群不等价不可约表示可以由两子群 D_{2n+1} 和 C_2 的不等价不可约表示直乘得到. 结果当然与上面是一致的.

* 四、I 群的特征标表

I 群有 60 个元素, 五个自逆类, 由 $1^2+3^2+3^2+4^2+5^2=60$ 知它有一个一维, 两个三维, 一个四维和一个五维不等价不可约的自共轭表示. I 群没有不变子群, 这给填写 I 群的特征标表增加了难度.

在建立 I 群乘法表时, 我们详细讨论过 I 群包含 D_5 子群和 T 子群, 一个典型的 D_5 子群由 z 轴方向的五次轴和 xy 平面的五个二次轴构成, 一个典型的 T 子群由四个三次轴和三个二次轴构成 [见式 (2.28)]. 先讨论两个三维不可约表示, 它们关于 D_5 子群的分导表示都不可能是三个一维表示的直和, 否则由表 3.10, 光是类 C_5 的特征标平方就要超过 60: $12 \times |\chi(C_5)|^2 = 12 \times 9 = 108$, 不符合不可约表示的条件 (3.47). 为了这两个三维表示的特征标与一维表示特征标正交 [见式 (3.41)], 它们关于 D_5 子群的分导表示只能分别是 D^B 和 D^{E_1} 或 D^{E_2} 的直和. 同理, 它们关于 T 子群的分导表示只能是不可约表示 D^T

$$\begin{aligned} &D^{T_1} \xrightarrow{D_5} D^B \oplus D^{E_1}, \qquad && D^{T_1} \xrightarrow{T} D^T \\ &D^{T_2} \xrightarrow{D_5} D^B \oplus D^{E_2}, \qquad && D^{T_2} \xrightarrow{T} D^T \end{aligned} \tag{3.80}$$

由此定出三维不可约表示的特征标, 列于表 3.14. 再讨论两个高维不可约表示. 同理, 它们关于 T 子群的分导表示必须包含三维表示 D^T, 而且不能包含多于一个恒等表示 D^A. 既然表示是自共轭的, 分导表示的分解是唯一的

$$D^G \xrightarrow{\mathrm{T}} D^T \oplus D^A, \qquad D^H \xrightarrow{\mathrm{T}} D^T \oplus D^E \oplus D^{E'} \tag{3.81}$$

由此定出了类 C_2' 和类 C_3' 在表示 D^G 和 D^H 中的特征标. 与前面相同的理由, 这两个表示关于 D_5 子群的分导表示必须包含 $D^{E_1} \oplus D^{E_2}$, 而类 C_2' 在两表示中的特征标限制了分导表示的分解方式, 得

$$D^G \xrightarrow{\mathrm{D}_5} D^{E_1} \oplus D^{E_2}, \qquad D^H \xrightarrow{\mathrm{D}_5} D^A \oplus D^{E_1} \oplus D^{E_2} \tag{3.82}$$

I 群的特征标表见表 3.14. 容易检验特征标满足式 (3.42) 和 (3.55). I 群的生成元在不可约表示中的表示矩阵见附录 6.

表 3.14 I群的特征标表

I	E	$12C_5$	$12C_5^2$	$20C_3'$	$15C_2'$
A	1	1	1	1	1
T_1	3	p^{-1}	$-p$	0	-1
T_2	3	$-p$	p^{-1}	0	-1
G	4	-1	-1	1	0
H	5	0	0	-1	1

注: $p = 2\cos(2\pi/5) = (\sqrt{5}-1)/2, \quad p^{-1} = -2\cos(4\pi/5) = (\sqrt{5}+1)/2$

3.6 物理应用

我们已经系统地介绍了有限群的表示理论, 研究了点群的特征标表. 物理中常见的无限群大多是连续群, 只要能适当地解决群函数对群元素的无限求和问题, 有限群表示理论中的大部分结论, 都可以推广. 下一章讨论的转动群就是一个典型的例子. 也有些群, 例如洛伦兹群, 这样的求和问题无法解决, 此时需用其他方法来处理. 事实上, 群论研究的主要对象就是寻找各种典型的群的所有不等价不可约表示, 研究可约表示的约化. 在对各种具体的群进行深入研究之前, 我们想强调一下群论方法在物理中的应用问题, 使我们今后的学习更有目的性.

一、定态波函数按对称群表示分类

在第二章一开始, 我们曾以具有空间反演不变性的系统为例, 说明系统的对称性可以用来对定态波函数进行分类, 从而简化跃迁矩阵元等的计算. 现在我们已经学习了群表示基本理论, 有条件把这一问题做较深入的探讨.

对给定的量子系统, 首先要根据系统的哈密顿量, 确定系统的对称变换群 G. 然后, 通过群论方法, 找到对称群的所有不等价不可约表示, 包括特征标表和在选定的表象中表示矩阵的标准形式. 这是群论本身研究的课题, 也是本书以后各章节主要讲解的问题. 假定系统对称群的所有不等价不可约表示已经找到, 它们的表示矩阵标准形式也已选定. 接下来我们要研究如何用对称群的不可约表示对定态波函数进行分类.

设系统哈密顿量与时间无关, 能级 E 是 m 重简并, 本征函数是标量函数

$$H\psi_\rho(x) = E\psi_\rho(x) \ , \qquad 1 \leqslant \rho \leqslant m \tag{3.83}$$

本征函数的集合架设对称群 G 的一个 m 维不变函数空间 $\mathcal{L}$, 对称变换算符 P_R 作用在函数基上, 仍是此空间的一个函数, 可以表成函数基的线性组合

$$P_R\psi_\rho(x) = \psi_\rho(R^{-1}x) = \sum_\lambda \ \psi_\lambda(x)D_{\lambda\rho}(R) \tag{3.84}$$

组合系数排列成 m 维方矩阵 $D(R)$, 它的集合是对称群 G 的一个 m 维表示, 描写本征函数在对称变换 R 中的变换规律, 称为能级 E 对应的表示. 给出了表示 $D(R)$, 它的特征标 $\chi(R)$ 也已知道.

在函数空间 $\mathcal{L}$ 中, 函数基的选择有任意性. 量子力学中用一组互相对易的完备力学量来共同确定这组函数基. 这是确定函数基的一种办法. 现在我们讨论群论方法确定函数基的原则.

对于任意选定的函数基 $\psi_\rho(x)$, 可以计算出相应的表示 $D(G)$ 及其特征标 $\chi(R)$. 在多数物理问题中, P_R 算符是幺正的, 只要我们选择函数基 $\psi_\rho(x)$ 是正交归一的, $D(G)$ 就是幺正表示. 一般说来, 这表示是可约的, 形式也不"标准". 我们先用特征标方法将它约化为标准不可约表示的直和

$$X^{-1}D(R)X = \bigoplus_j \ a_jD^j(R) \tag{3.85}$$

$$\chi(R) = \sum_j \ a_j\chi^j(R) \ , \qquad a_j = \frac{1}{g}\sum_{R\in G} \ \chi^j(R)^*\chi(R) \tag{3.86}$$

a_j 是不可约表示 $D^j(G)$ 在表示 $D(G)$ 中的重数, 可由式 (3.86) 算出. 因此式 (3.85) 的右边是已知的, X 矩阵原则上可以计算出来. 注意, 作为相似变换关系, 式 (3.85) 并没有完全确定 X 矩阵. 与式 (3.85) 右边的方块矩阵对易的任何矩阵 Y, 右乘到 X 矩阵上, 都可以作为式 (3.85) 的相似变换矩阵. 一般说来, X 包含有 $\sum_j a_j^2$ 个未定参数. 通常选取这些参数, 使 X 矩阵尽量简单, 例如使 X 是实正交矩阵等.

在具体计算 X 矩阵时, 只要让生成元满足式 (3.85), 其他元素也一定满足此式. 作为标准的不可约表示形式, 常使尽可能多的生成元所对应的表示矩阵是对角化的.

当然, 只要群 G 不是阿贝尔的, 至少对真实表示, 生成元的表示矩阵不能都对角化. 就表示矩阵 $D^j(R)$ 对角化的生成元 (记作 A) 而言, 式 (3.85) 正是把矩阵 $D(A)$ 对角化的相似变换关系. 计算这些 $D(A)$ 矩阵的本征值和本征矢量就可以基本确定相似变换 X. 这里说的"基本", 指 X 矩阵还会包含待定参数, 这些参数有待把其他生成元代入式 (3.85) 来计算. 有时为了计算方便, 也可以多取几个元素代入式 (3.85) 做计算. 为了避免计算逆矩阵 X^{-1}, 计算中可把 X^{-1} 移到等式右面. 正如前面所说, 即使在所有生成元都满足式 (3.85) 后, X 矩阵还会包含 $\sum_j a_j^2$ 个未定参数, 应该选定这些参数使 X 矩阵尽量简单.

由式 (3.85) 可知, X 矩阵的行指标和 $D(R)$ 的矩阵指标相同, 例如记作 ρ, 列指标和等式右面的矩阵指标相同. 等式右面是方块矩阵, 先由指标 j 和 μ 来区分哪个方块 (表示) 的哪一行, 当 D^j 表示的重数大于 1 时, 还需一个指标 r 来区分重表示 D^j 中哪一个, 即需用三个指标 $j\mu r$ 来共同描写 X 矩阵的列指标. 用几个指标作为一个整体, 共同描写矩阵的行 (或列), 而且一个矩阵的行和列指标用不同的方式来描写, 这在群论中是常见的事. 在式 (3.54) 我们已经用过. 希望读者能够习惯这种描写方法.

在线性代数中我们已经熟悉 (见 1.3 节) 这类变换: X 矩阵一方面作为相似变换矩阵, 改变算符的矩阵形式, 另一方面又作为组合系数, 把旧的函数基组合成新的函数基. 组合后的新函数基 $\Psi^j_{\mu r}$ 需用三个指标标记, 在对称变换中, 按不可约表示 D^j 变换

$$\Psi^j_{\mu r}(x) = \sum_\rho \ \psi_\rho(x) X_{\rho, j\mu r} \ , \qquad \psi_\rho(x) = \sum_{j\mu r} \ \Psi^j_{\mu r}(x) \left(X^{-1}\right)_{j\mu r, \rho} \tag{3.87}$$

$$P_R \Psi^j_{\mu r}(x) = \sum_\nu \ \Psi^j_{\nu r}(x) D^j_{\nu\mu}(R) \tag{3.88}$$

具有这样变换性质的函数基 $\Psi^j_{\mu r}(x)$ 称为属不可约表示 D^j μ 行的函数, 这才是按群论方法选定的标准的函数基. 用这方法把定态波函数组合成属于对称群确定不可约表示确定行的函数, 也就是用对称群表示对定态波函数进行分类.

属不可约表示 D^j μ 行的函数 $\Psi^j_{\mu r}(x)$, 它的物理意义当然与具体的群有关, 也和表示选取的表象有关. 例如, 通常选取的不可约表示的标准形式, 常使尽可能多的生成元的表示矩阵对角化, 式 (3.88) 也就是这些生成元的共同本征方程. 用量子力学语言来说, 这样选取的函数基就是这些力学量的共同本征函数. 当 $a_j > 1$ 时, 需引入参数 r 以区分 a_j 组属同一不可约表示的函数基 $\Psi^j_{\mu r}(x)$. 这几组函数基, 允许关于 r 做相同的线性组合

$$\Phi^j_{\mu s} = \sum_r \ \Psi^j_{\mu r} Y_{rs} \tag{3.89}$$

这组合矩阵 Y 需用其他条件来确定, 例如要求形式简单等. 通常认为这种任意性的出现, 反映了对系统对称性的发掘还不够, 即还可能存在更大的对称变换群.

本小节介绍的组合定态波函数的方法, 是群论的基本运算方法, 今后会多次见到各种实例, 还可能以不同的形式出现. 希望读者对此方法给予足够的重视, 深刻领会, 熟练而灵活地运用.

二、克莱布施–戈登级数和系数

在第一章讨论两矩阵直乘时曾指出, 直乘表示与合成系统波函数的变换性质有关. 研究两不可约表示直乘表示的约化, 是计算可约表示约化问题中特别重要的一类问题. 设合成系统由两个子系统组成, 子系统有共同的对称变换群 G, 波函数分别按群 G 不可约表示变换

$$P_R\psi^j_\mu(1)=\sum_\rho \psi^j_\rho(1)D^j_{\rho\mu}(R), \qquad P_R\phi^k_\nu(2)=\sum_\lambda \phi^k_\lambda(2)D^k_{\lambda\nu}(R) \tag{3.90}$$

合成系统的波函数是它们的乘积, $\varPsi^{jk}_{\mu\nu}(1,2)=\psi^j_\mu(1)\phi^k_\mu(2)$, 按直乘表示变换

$$\begin{aligned} P_R\varPsi^{jk}_{\mu\nu}(1,2)&=\sum_{\rho\lambda}\varPsi^{jk}_{\rho\lambda}(1,2)\left[D^j(R)\times D^k(R)\right]_{\rho\lambda,\mu\nu}\ , \\ \left[D^j(R)\times D^k(R)\right]_{\rho\lambda,\mu\nu}&=D^j_{\rho\mu}(R)D^k_{\lambda\nu}(R) \end{aligned} \tag{3.91}$$

用相似变换 C^{jk} 来约化直乘表示

$$\begin{aligned} \left(C^{jk}\right)^{-1}\left[D^j(R)\times D^k(R)\right]C^{jk}&=\bigoplus_J a_J D^J(R)\ , \\ \chi^j(R)\chi^k(R)&=\sum_J a_J\chi^J(R) \end{aligned} \tag{3.92}$$

等式左面的级数称为克莱布施 (Clebsch)– 戈登 (Gordan) 级数, C^{jk} 矩阵称为克莱布施 – 戈登矩阵, 矩阵元素 $C^{jk}_{\mu\nu,JMr}$ 称为克莱布施 – 戈登系数, 其中行指标与直乘矩阵的行 (列) 指标相同, 取 $\mu\nu$; 列指标与约化后的直和表示的行 (列) 指标相同, 取 JMr. 在表示 $D^J(G)$ 的重数 a_J 大于 1 时, 需要引入附加的指标 r 来区分这 a_J 个表示 $D^J(G)$. 这些克莱布施 – 戈登系数把合成系统的波函数 $\varPsi^{jk}_{\mu\nu}(1,2)$ 组合成属于不可约表示的波函数

$$\begin{aligned} \varPhi^J_{Mr}(1,2)&=\sum_{\mu\nu}\varPsi^{jk}_{\mu\nu}(1,2)C^{jk}_{\mu\nu,JMr} \\ P_R\varPhi^J_{Mr}(1,2)&=\sum_{M'}\varPhi^J_{M'r}(1,2)D^J_{M'M}(R) \end{aligned} \tag{3.93}$$

对给定的群, 克莱布施 – 戈登系数与选用的不可约表示标准形式有关. 对有限群, 表示是幺正的, 克莱布施 – 戈登矩阵 C^{jk} 也是幺正的, 而且常常可以选择其中

包含的未定参数, 使它是实正交的. 物理中常见的对称群的克莱布施 – 戈登系数都有专门的书籍列表给出. 通常克莱布施 – 戈登系数有几种列举方法. 除了列表法外, 常用类似式 (3.93) 那样的展开式列出. 展开式方法避免了许多等于零的系数, 也比较好用, 但篇幅较大. 只有少数群, 如下一章的三维转动群, 克莱布施 – 戈登系数存在解析公式. 附录 4 列出若干点群的克莱布施 – 戈登系数.

三、维格纳–埃伽定理

下面的定理可以说是群论方法在量子力学中得到广泛应用的基础, 它也解释了为什么要把定态波函数组合成属于对称群确定不可约表示确定行的函数.

定理六 (维格纳 (Wigner)–埃伽 (Eckart) 定理) 属幺正线性变换群 P_G 的两不等价不可约表示的函数互相正交, 属同一不可约幺正表示不同行的函数也互相正交, 属同一不可约幺正表示同一行的函数间的内积与行数无关.

证明 设函数基 ψ^j_μ 和 ϕ^k_ν 分属群 P_G 不可约幺正表示 D^j μ 行和 D^k ν 行

$$P_R\psi^j_\mu(x) = \sum_\rho \psi^j_\rho(x)D^j_{\rho\mu}(R), \qquad P_R\phi^k_\nu(x) = \sum_\lambda \phi^k_\lambda(x)D^k_{\lambda\nu}(R)$$

令

$$\langle\phi^k_\nu(x)|\psi^j_\mu(x)\rangle = X^{kj}_{\nu\mu}$$

$$\begin{aligned}\langle\phi^k_\nu(x)|P_R\psi^j_\mu(x)\rangle &= \sum_\rho \langle\phi^k_\nu(x)|\psi^j_\rho(x)\rangle D^j_{\rho\mu}(R) = \sum_\rho X^{kj}_{\nu\rho}D^j_{\rho\mu}(R)\\ &= \langle P_R^{-1}\phi^k_\nu(x)|\psi^j_\mu(x)\rangle = \sum_\lambda D^k_{\lambda\nu}(R^{-1})^*\langle\phi^k_\lambda(x)|\psi^j_\mu(x)\rangle = \sum_\lambda D^k_{\nu\lambda}(R)X^{kj}_{\lambda\mu}\end{aligned} \tag{3.94}$$

由舒尔定理知

$$X^{kj}_{\nu\mu} = \begin{cases} 0, & \text{当} \ \ k \neq j \\ \delta_{\nu\mu}\ \langle k\|j\rangle\ , & \text{当} \ \ k = j \end{cases}$$

$$\langle\phi^k_\nu(x)|\psi^j_\mu(x)\rangle = \delta_{kj}\delta_{\nu\mu}\langle k\|j\rangle \tag{3.95}$$

其中, $\langle k\|j\rangle$ 是常数, 它与下标 μ 无关, 称为约化矩阵元. 证完.

属幺正线性变换群 P_G 的两不等价不可约幺正表示的函数都互相正交, 因而这里的表示幺正性并不重要. 但在得出属同一不可约幺正表示不同行的函数互相正交时, 表示的幺正性就十分重要.

量子力学中, 物理观测量的计算多数归结为矩阵元的计算, 当把定态波函数组合成属于对称变换群确定不可约表示确定行的函数后, 维格纳 – 埃伽定理使 $m_k m_j$ 个矩阵元 $\langle\phi^k_\nu(x)|\psi^j_\mu(x)\rangle$ 的计算简化为一个矩阵元的计算问题. 在实际问题里, 定态波函数很难严格求解, 波函数的具体形式经常并不知道, 因而连一个矩阵元都不会计算. 但是仅仅根据系统对称性质的分析, 我们已能知道什么样状态之间的矩阵元

为零 (选择定则), 也可以把约化矩阵元看作参数, 通过消去参数, 掌握不同矩阵元 (观测量) 之间的相对关系. 这就是常说的, 通过系统对称性的研究, 掌握系统某些精确的与细节无关的重要性质. 这些问题今后还会通过具体例子加以说明.

当力学量算符在对称变换中的变换性质已知时, 维格纳 - 埃伽定理还可简化力学量矩阵元的计算. 设一组力学量算符 $L_\rho^k(x)$ 在对称变换 P_R 作用下按下式变换

$$P_R L_\rho^k(x) P_R^{-1} = \sum_\lambda L_\lambda^k(x) D_{\lambda\rho}^k(R) \tag{3.96}$$

这组算符常称不可约张量算符, 则

$$P_R L_\rho^k(x)\psi_\mu^j(x) = \sum_{\lambda\tau} L_\lambda^k(x)\psi_\tau^j(x)\left[D^k(R)\times D^j(R)\right]_{\lambda\tau,\rho\mu} \tag{3.97}$$

既然函数 $L_\rho^k(x)\psi_\mu^j(x)$ 按直乘表示变换, 可用克莱布施 - 戈登系数把它们组合成属不可约表示 D^J M 行的函数 $F_{Mr}^J(x)$

$$\begin{aligned}
F_{Mr}^J(x) &= \sum_{\rho\mu} L_\rho^k(x)\psi_\mu^j(x) C_{\rho\mu,JMr}^{kj} \\
P_R F_{Mr}^J(x) &= \sum_{M'} F_{M'r}^J(x) D_{M'M}^J(R) \\
L_\rho^k(x)\psi_\mu^j(x) &= \sum_{JMr} F_{Mr}^J(x)\left[\left(C^{kj}\right)^{-1}\right]_{JMr,\rho\mu}
\end{aligned} \tag{3.98}$$

力学量 $L_\rho^k(x)$ 在定态波函数中的 $m_{j'}m_k m_j$ 个矩阵元的计算, 简化为有限几个约化矩阵元的计算

$$\begin{aligned}
\langle\phi_\nu^{j'}(x)|L_\rho^k(x)|\psi_\mu^j(x)\rangle &= \sum_{JMr} \langle\phi_\nu^{j'}(x)|F_{Mr}^J(x)\rangle\left[\left(C^{kj}\right)^{-1}\right]_{JMr,\rho\mu} \\
&= \sum_r \langle\phi^{j'}||L^k||\psi^j\rangle_r\left[\left(C^{kj}\right)^{-1}\right]_{j'\nu r,\rho\mu}
\end{aligned} \tag{3.99}$$

而把与对称变换有关的信息通过已知的克莱布施 - 戈登系数表现出来. 约化矩阵元的个数等于不可约表示 $D^{j'}$ 在直乘表示 $D^k\times D^j$ 的约化中出现的次数.

四、正则简并和偶然简并

设能级 E 是 m 重简并的, 对应对称变换群 G 的表示 $D(G)$. 若此表示是群 G 的不可约表示, 则此简并称为正则 (normal) 简并; 若是可约表示, 则称为偶然 (accidental) 简并.

现在引入微扰相互作用 $H_1(x)$, 设它和原始哈密顿量 $H_0(x)$ 有相同的对称性, 称为对称微扰, 即在对称变换中两个哈密顿量都保持不变

$$[P_R,\ H_0(x)] = 0\ , \qquad [P_R,\ H_1(x)] = 0 \tag{3.100}$$

首先, 用上法把 $H_0(x)$ 的本征波函数组合成属于对称变换群 G 确定不可约表示确定行的函数 $\psi_\mu^j(x)$

$$P_R\psi_\mu^j(x)=\sum_\nu \psi_\nu^j(x)D_{\nu\mu}^j(R)$$

在 P_R 的作用下, $H_1\psi_\mu^j(x)$ 具有相同的变换性质

$$P_R\left[H_1(x)\psi_\mu^j(x)\right]=H_1(x)P_R\psi_\mu^j(x)=\sum_\nu \left[H_1(x)\psi_\nu^j(x)\right]D_{\nu\mu}^j(R) \tag{3.101}$$

这一性质称为对称微扰不改变波函数的变换性质.

从量子力学知, 能量一级修正由 H_1 在 H_0 本征函数中的矩阵元决定. 对正则简并, 有

$$\langle\psi_\nu^j(x)|H_1(x)|\psi_\mu^j(x)\rangle=\delta_{\nu\mu}\left(\Delta E^j\right) \tag{3.102}$$

能量修正 ΔE^j 与 μ 无关, 能级发生平移但不分裂, 即对称微扰不能解除正则简并. 事实上, 这是一个非微扰的结论, 对称性保证了正则简并的能级不会分裂. 这一结论可做如下理解: 让总哈密顿量随参数 λ 连续变化, $H=H_0+\lambda H_1$. 当 λ 由 0 到 1 连续变化时, H 的本征函数也由 ψ_μ^j 出发连续变化, 所有的相关量都只能做连续变化, 不能做不连续的跳跃. 由于在连续变化过程中对称性始终保持, 波函数必定属于群 G 的一定表示. 定理六告诉我们, 属不等价不可约表示的波函数是互相正交的, 因而波函数不能突然跳跃到与原波函数正交的函数中去, 波函数所属表示就无变化. 也就是说, 在参数 λ 连续变化过程中, 哈密顿量本征函数所属的不可约表示不变, 能级的简并度也不变. 由于哈密顿量和对称变换算符 P_R 对易, 属同一不可约表示的哈密顿量本征函数, 它们的本征值必定相同, 因而正则简并的能级不会分裂.

对偶然简并, 先假定能级对应的可约表示中包含的各不可约表示互不等价. 属同一不可约表示各行的函数, 能级移动相同, 能级不会分裂, 但属两个不等价不可约表示的函数, 能级移动一般不相等, 于是能级分裂了. 在对称微扰下, 偶然简并的能级可以分裂, 但最多分裂到正则简并, 而且用对称群不可约表示标记的原始波函数是好的零级波函数. 若偶然简并对应的表示包含重表示, 则属这些相重不可约表示的函数的任意组合仍属同一个不可约表示, 如式 (3.89) 所示. 确定这些组波函数的组合, 群论就无能为力了. 此时 H_1 在这些组波函数间的矩阵未必对角化. 尽管如此, 定理六告诉我们, 可按计算方便, 任意选取确定的 μ, 计算 $a_j\times a_j$ 矩阵

$$\langle\psi_{\mu r}^j(x)|H_1(x)\psi_{\mu s}^j(x)\rangle=\left(\Delta E^j\right)_{rs} \tag{3.103}$$

其中, r 和 s 取 1 至表示重数 a_j. 把此矩阵对角化, 就得到好的零级波函数和能量的一级修正. 与不用对称性选取零级波函数的一般方法相比较, 群论方法使 $(a_jm_j)^2$ 个矩阵元的计算问题, 简化为 a_j^2 个矩阵元的计算问题, 还是大大减少了工作量.

通常认为, 如果群 G 包括了系统哈密顿量 H 的全部对称变换, 能级只能是正则简并. 偶然简并与系统尚未发现的对称性有关. 四川大学的邹鹏程教授和他的学生撰文 [96] 证明了这一结论.

如果 H_1 的对称群 G' 是 H_0 对称群 G 的子群, G' 就是 H_0 和 H_1 的共同对称群. 用 G' 代替 G, 前面的讨论仍然适用, 在微扰 H_1 的作用下, 能级最多分裂到关于 G' 的正则简并. 要注意的是, 即使 H_0 的能级关于 G 是正则简并的, 关于 G' 仍可能是偶然简并.

五、一个物理应用的实例

我们举一个量子力学的简单例子, 说明群论方法在量子力学中应用的一般步骤. 讨论一个有方形势阱的二维量子力学系统, 哈密顿方程 ($\hbar = 2m = 1$) 为

$$
\begin{aligned}
&H\psi = -\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} - \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}y^2} + V\psi = E\psi\ , \\
&V(x,y) = \begin{cases} 0, & \text{当}\ |x| < \pi\ ,\ \ |y| < \pi \\ \infty, & \text{其他} \end{cases}
\end{aligned}
\tag{3.104}
$$

第一步, 研究系统的对称变换群. 二维方形势阱显然具有 D_4 群对称性. D_4 群特征标表已列在表 3.12. 两个生成元取绕 z 轴转动 $\pi/2$ 角的变换 C_4 和绕 x 轴转动 π 角的变换 C_2'. 为简化符号, 把它们分别记作 T 和 S. 根据式 (3.78), 它们在二维表示 D^E 中的矩阵元为

$$
D^E(T) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad D^E(S) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3.105}
$$

这矩阵就是生成元在二维空间的坐标变换矩阵

$$
\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \qquad R = D^E(R)
$$

第二步, 按对称群表示对定态波函数进行分类. 用分离变量法求解哈密顿方程, 设

$$
\psi(x,y) = X(x)Y(y)
$$

则在方形区域内及其边界上

$$
\begin{aligned}
&X'' + E_1 X = 0\ , \qquad Y'' + E_2 Y = 0\ , \qquad |x| \leqslant \pi, \qquad |y| \leqslant \pi\ , \\
&X(\pm\pi) = Y(\pm\pi) = 0, \qquad E = E_1 + E_2
\end{aligned}
$$

解得

$$X(x)=\begin{cases}\sin(mx)\ , & E_1=m^2\\ \cos\left[(2m+1)x/2\right]\ , & E_1=(2m+1)^2/4\end{cases}$$

$$Y(y)=\begin{cases}\sin(ny)\ , & E_2=n^2\\ \cos\left[(2n+1)y/2\right]\ , & E_2=(2n+1)^2/4\end{cases}$$

其中, m 和 n 均为正整数或零. 共有五种类型的能级, 它们的本征函数如下 ($m\neq n$):

(1) $E=(2m+1)^2/2$, $\psi=\cos\left[(2m+1)x/2\right]\cos\left[(2m+1)y/2\right]$.

(2) $E=2m^2$, $\psi=\sin(mx)\sin(my)$.

(3) $E=m^2+n^2$, $\psi_1=\sin(mx)\sin(ny)$, $\psi_2=\sin(nx)\sin(my)$.

(4) $E=(2m+1)^2/4+(2n+1)^2/4$,

$$\psi_1=\cos\left[(2m+1)x/2\right]\cos\left[(2n+1)y/2\right]\ ,$$
$$\psi_2=\cos\left[(2n+1)x/2\right]\cos\left[(2m+1)y/2\right]\ .$$

(5) $E=m^2+(2n+1)^2/4$,

$$\psi_1=\sin(mx)\cos\left[(2n+1)y/2\right]\ ,\qquad \psi_2=\cos\left[(2n+1)x/2\right]\sin(my)\ .$$

前两种情况能级不简并, 后三种情况能级二重简并. 现在用式 (3.84) 来确定各能级对应的表示. 用生成元作用, 计算出表示矩阵和特征标后, 与表 3.12 比较, 确定相应的表示及其约化. 在计算中请注意在式 (3.84) 中, P_R 的作用, 先把 $\psi(x)$ 中的变量 x 变成 $R^{-1}x$, 然后把它看成 x 的函数, 才得到新的函数 $P_R\psi(x)$, 这里的 x 代表两个变量 x 和 y, R^{-1} 取式 (3.105) 的逆变换

$$D^E(T^{-1})=\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix},\qquad D^E(S^{-1})=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\tag{3.106}$$

其次, 要注意式 (3.84) 右边是对表示矩阵行指标求和, 当 P_R 作用在 ψ_μ 上, 算出的是表示矩阵的第 μ 列矩阵元素, 而不是第 μ 行矩阵元素. 有了这两条, 下面的计算就十分容易. 具体计算方法同式 (3.18) 的计算. 希望读者在阅读下面部分时, 一定要同时在纸上做计算, 只有这样才能真正理解.

(1) $P_T\psi=P_S\psi=\psi$, $D(T)=D(S)=1$, 因而对应恒等表示 D^{A_1}.

(2) $P_T\psi=P_S\psi=-\psi$, $D(T)=D(S)=-1$, 因而对应 D^{B_2} 表示.

(3) $P_T\psi_1=-\psi_2$, $P_T\psi_2=-\psi_1$, $P_S\psi_1=-\psi_1$, $P_S\psi_2=-\psi_2$, 因而

$$D(T)=\begin{pmatrix}0 & -1\\ -1 & 0\end{pmatrix},\qquad D(S)=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},$$
$$\chi(T)=0,\qquad \chi(S)=-2$$

由式 (3.86) 计算得, 此能级对应表示 $D^{A_2}\oplus D^{B_2}$. $D(S)$ 是常数矩阵, 通过计算 $D(T)$ 的本征矢量, 把 $D(T)$ 对角化

$$X^{-1}D(T)X=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},\qquad X^{-1}D(S)X=\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix},$$

$$X=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\-1&1\end{pmatrix},\qquad \begin{aligned}\Phi_1&=(\psi_1-\psi_2)/\sqrt{2}\ ,\\ \Phi_2&=(\psi_1+\psi_2)/\sqrt{2}\end{aligned}$$

Φ_1 属表示 D^{A_2}, Φ_2 属表示 D^{B_2}.

(4) $P_T\psi_1=\psi_2$, $P_T\psi_2=\psi_1$, $P_S\psi_1=\psi_1$, $P_S\psi_2=\psi_2$, 因而

$$D(T)=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\qquad D(S)=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},$$
$$\chi(T)=0,\qquad \chi(S)=2$$

类似的计算得, 此能级对应表示 $D^{A_1}\oplus D^{B_1}$

$$\Phi_1=(\psi_1+\psi_2)/\sqrt{2}\ ,\qquad \Phi_2=(\psi_1-\psi_2)/\sqrt{2}$$

Φ_1 属表示 D^{A_1}, Φ_2 属表示 D^{B_1}.

(5) $P_T\psi_1=\psi_2$, $P_T\psi_2=-\psi_1$, $P_S\psi_1=\psi_1$, $P_S\psi_2=-\psi_2$, 因而

$$D(T)=\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix},\qquad D(S)=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},$$
$$\chi(T)=0,\qquad \chi(S)=0$$

这正是不可约表示 D^E.

在五类能级中, 情况 (1) 和 (2) 没有简并, 可算是正则简并的特殊情况. 情况 (3) 和 (4) 是偶然简并, 情况 (5) 是正则简并. 对于某些特殊的能级, 还可能有更大的偶然简并. 例如, 情况 (3) 中, $m=1$, $n=8$ 和 $m=4$, $n=7$, 它们的能量都是 $E=65$. 又如, 情况 (3) 中的 $m=1$ 和 $n=7$, 与情况 (2) 中的 $m=5$, 能量都是 $E=50$. 这类能级简并度更高, 但能级对应的表示, 正是上述两种情况对应的表示的直和. 分析起来没有新的困难.

最后, 我们讨论在对称微扰哈密顿量 $H_1=\varepsilon x^2y^2$ 作用下能级的移动和分裂. D_4 群是 H_0 和 H_1 的共同对称变换群. 因此, 在 H_1 的作用下, 正则简并的能级只能发生能级移动, 不能发生能级分裂. 以情况 (5) 为例, 直接计算可知

$$\langle\psi_1|H_1\psi_1\rangle=\langle\psi_2|H_1\psi_2\rangle=\varepsilon\left\{\frac{\pi^3}{3}-\frac{\pi}{2m^2}\right\}\left\{\frac{\pi^3}{3}-\frac{2\pi}{(2n+1)^2}\right\}$$
$$\langle\psi_1|H_1\psi_2\rangle=\langle\psi_2|H_1\psi_1\rangle=0$$

从群论角度看, 由于定态波函数已经按对称变换群的不可约表示进行分类, 在对称微扰作用下能级不会分裂. 因此, 上式四个矩阵元中, 对角矩阵元相等, 非对角矩阵元为零. 需要计算的只有一个矩阵元.

对情况 (3) 和 (4), 对称微扰使偶然简并能级分裂. 如果我们已经用群论方法, 按对称变换群的不可约表示来选择定态波函数 Φ_μ, 那么 H_1 在此波函数中的矩阵是对角化的. 而在任意选取的波函数 ψ_μ 中, H_1 的矩阵一般就不是对角化的. 量子力学中, 使 H_1 对角化的波函数 Φ_μ 称为好的零级波函数. 以情况 (3) 为例, 计算表明

$$\begin{aligned}\langle \Phi_1|H_1\Phi_1\rangle =&\varepsilon\left\{\frac{\pi^3}{3}-\frac{\pi}{2m^2}\right\}\left\{\frac{\pi^3}{3}-\frac{\pi}{2n^2}\right\}\\&-\varepsilon(-1)^{m-n}\left\{\frac{2\pi}{(m-n)^2}-\frac{2\pi}{(m+n)^2}\right\}^2\\\langle \Phi_2|H_1\Phi_2\rangle =&\varepsilon\left\{\frac{\pi^3}{3}-\frac{\pi}{2m^2}\right\}\left\{\frac{\pi^3}{3}-\frac{\pi}{2n^2}\right\}\\&+\varepsilon(-1)^{m-n}\left\{\frac{2\pi}{(m-n)^2}-\frac{2\pi}{(m+n)^2}\right\}^2\\\langle \Phi_1|H_1\Phi_2\rangle =&\langle \Phi_2|H_1\Phi_1\rangle = 0\end{aligned}$$

反过来说, 选择对称变换群的适当的不变函数空间, 可以用来找群的不等价不可约表示. 下一章找三维空间转动群的不等价不可约表示，就是采用这种方法.

*3.7 有限群群代数的不可约基

除了平庸的 C_1 群外, 有限群的正则表示都是可约表示, 在它的约化中, 每个不可约表示的重数等于表示的维数, 因此把正则表示约化, 是计算有限群不等价不可约表示的一种方法. 把正则表示约化得到的群元素的组合, 称为有限群群代数的不可约基. 系统哈密顿量各简并能级的函数空间是对称群的不变空间. 把不可约基作用到哈密顿量本征函数上, 能把本征函数投影成属对称群不可约表示的函数基, 这就解决了按群论方法选择哈密顿量本征函数基的计算问题. 在有的物理问题中这是非常有用的方法, 例如分子振动能谱的研究中常用这方法计算属不可约表示的函数基. 本节研究约化正则表示的方法及其在物理问题中的应用.

一、有限群正则表示的约化

有限群 G 的群代数中, 群元素既可以作为矢量, 又可以作为线性算符, 而且这线性算符可以从左面或右面作用在矢量上, 让矢量发生特定的变化. 在 3.1 节中已经讨论过, 如果群代数中取自然基, 左乘群元素得到正则表示 (3.7), 右乘群元素, 在

算符的矩阵形式取转置的条件下, 得到与正则表示等价的表示 (3.11). 正则表示可以约化为不可约表示的直和, 而且有限群每一个不可约表示 D^j 在正则表示约化中的重数等于该表示的维数 m_j

$$X^{-1}D(R)X = \bigoplus_j m_j D^j(R) ,$$
$$\phi^j_{\mu r} = \sum_{R\in G} RX_{R,j\mu r}, \qquad S\phi^j_{\mu r} = \sum_\nu \phi^j_{\nu r} D^j_{\nu\mu}(S) \tag{3.107}$$

r 区分这 m_j 组属群 G 同一个不可约表示 D^j 同一行 μ 的矢量基. 因为左乘群元素和右乘群元素的运算是独立进行的, 所以右乘群元素不会改变矢量基在左乘群元素作用下的性质, 即 $\phi^j_{\mu r}S$ 仍属不可约表示 D^j 的 μ 行. 这样, m_j 个矢量基 $\phi^j_{\mu r}$ 架设对右乘群元素不变的子空间, 对应群 G 的一个 m_j 维表示 $\overline{D}^j$

$$\phi^j_{\mu r}S = \sum_t \overline{D}^j_{rt}(S)\phi^j_{\mu t}$$

这样的 m_j 维表示 $\overline{D}^j$ 空间有 m_j 个, 用指标 μ 区分. 既然在群代数中, 右乘群元素得到的表示与正则表示等价, 约化后每个不可约表示的重数仍是表示的维数 m_j, 可见这表示 $\overline{D}^j$ 和不可约表示 D^j 等价. 把矢量基做适当组合, 可使两表示相同. 这不算证明, 第六章会对这结论做出严格的证明. 因此, 在有限群 G 的群代数中可以选择一组矢量基 $\phi^j_{\mu r}$, 称为不可约基, 满足

$$S\phi^j_{\mu r} = \sum_\nu \phi^j_{\nu r} D^j_{\nu\mu}(S), \qquad \phi^j_{\mu r}S = \sum_t D^j_{rt}(S)\phi^j_{\mu t} \tag{3.108}$$

本来在把正则表示约化时, 属同一不可约表示的若干组基的选择有任意性, 它们的任意非奇线性组合都可作为不可约基. 现在式 (3.108) 对不可约基的选择提出了合理的条件. 当表示矩阵的标准形式选定以后, 不可约基之间通过变换式 (3.108) 密切地联系起来, 属同一个不可约表示的所有基 $\phi^j_{\mu r}$, 除了允许乘一个只依赖于指标 j 的公共因子外, 不再有其他的任意性. 式 (3.108) 是计算不可约基的基本方程式, 其中元素 S 该取群 G 的所有元素, 但实际取生成元就够了. 有时为了计算方便可多取若干个元素.

设哈密顿量 $H(x)$ 的能级 E 是 m 重简并的, 本征函数记作 $\psi_\rho(x)$. 按群论方法, 需要把这函数基 $\psi_\rho(x)$ 组合成属于对称群 G 不可约表示的基. 上一节已经详细讨论了这种组合的计算方法. 但是, 如果对称群 G 的不可约基 $\phi^j_{\mu r}$ 已经知道, 把其中的群元素 R 换成函数变换算符 P_R, 作为投影算符作用在函数基上, $\phi^j_{\mu r}\psi_\rho(x)$ 就是属不可约表示的函数基. 事实上, 只要 $\phi^j_{\mu r}\psi_\rho(x)$ 不为零, 由式 (3.108) 就有

$$P_S\left[\phi^j_{\mu r}\psi_\rho(x)\right] = \sum_\nu \left[\phi^j_{\nu r}\psi_\rho(x)\right] D^j_{\nu\mu}(S) \tag{3.109}$$

二、D_3 群群代数的不可约基

群代数的不可约基当然可用上一节介绍的相似变换方法来计算, 但本节要介绍投影算符的方法, 用 D_3 群作为例子, 然后推广. D_3 群是最简单的非阿贝尔群, 在不少物理问题中经常采用 D_3 群作为例子, 因而 D_3 群群代数的不可约基是很有用的.

D_3 群包含六个元素, 三个类, 乘法表由表 2.6 给出. D_3 群有两个一维和一个二维不等价不可约表示, 特征标表由表 3.7 给出. 生成元取 A 和 D, 二维表示 D^E 的标准形式由式 (2.10) 给出

$$D^E(A) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad D^E(D) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}$$

在此形式中, 生成元 A 的表示矩阵是对角化的. 因此, D_3 群群代数的不可约基 $\phi^j_{\mu r}$ 是左乘和右乘 A 的共同本征矢量

$$\begin{aligned} &A\phi^A = \phi^A A = \phi^A, \qquad A\phi^B = \phi^B A = -\phi^B , \\ &A\phi^E_{1r} = \phi^E_{1r}, \qquad \phi^A_{\mu 1} A = \phi^A_{\mu 1}, \qquad A\phi^E_{2r} = -\phi^E_{2r}, \qquad \phi^A_{\mu 2} A = -\phi^A_{\mu 2} \end{aligned} \tag{3.110}$$

因为 A 的阶数为 $a = 2$, 所以本征值只能是 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi/a} = -1$ 的幂次. 通常用这幂次来标记不可约基的下标. 现在这幂次取 0, 1, mod 2, 就是说, 逢 2 的倍数可以去掉. 在这种标记下, D_3 群群代数的不可约基 $\phi^j_{\mu\nu}$ 改记为 $\phi^j_{\rho\lambda}$

$$\begin{aligned} &\phi^A \longrightarrow \phi^A_{00}, \qquad \phi^B \longrightarrow \phi^B_{11}, \\ &\phi^E_{11} \longrightarrow \phi^E_{00}, \qquad \phi^E_{12} \longrightarrow \phi^E_{01}, \\ &\phi^E_{21} \longrightarrow \phi^E_{10}, \qquad \phi^E_{22} \longrightarrow \phi^E_{11} \end{aligned} \tag{3.111}$$

现在我们要根据 A 的本征值把群代数的矢量进行分类. 本小节先做常规计算, 下一小节再介绍普遍的投影算符方法.

对群代数的自然基, 左乘和右乘群元素分别得到两个等价的正则表示, D_3 群的这两个正则表示 $D(R)$ 和 $\overline{D}(R)$ 已由式 (3.9) 和 (3.12) 给出. 对生成元 A, $D(A)$ 和 $\overline{D}(A)$ 都是三个 σ_1 矩阵的直和, 只是子矩阵涉及的行 (列), 对 $D(A)$ 是 $(1,4)$, $(2,6)$ 和 $(3,5)$, 对 $\overline{D}(A)$ 是 $(1,4)$, $(2,5)$ 和 $(3,6)$. 因此, 左乘 A 的本征值为 $(-1)^\rho$ 的本征矢量为

$$AF^{(1)}_\rho = (-1)^\rho F^{(1)}_\rho, \qquad F^{(1)}_\rho = (aE + bD + cF) + (-1)^\rho (aA + cB + bC)$$

右乘 A 的本征值为 $(-1)^\lambda$ 的本征矢量为

$$F^{(2)}_\lambda A = (-1)^\lambda F^{(2)}_\lambda, \qquad F^{(2)}_\lambda = (a'E + b'D + c'F) + (-1)^\lambda (a'A + b'B + c'C)$$

合并起来，得左乘和右乘 A 的共同本征矢量 $\Phi_{\rho\lambda}$ 为

$$\begin{aligned}&A\Phi_{\rho\lambda}=(-1)^{\rho}\Phi_{\rho\lambda},\qquad \Phi_{\rho\lambda}A=(-1)^{\lambda}\Phi_{\rho\lambda},\\&\Phi_{\rho\rho}=(aE+bD+bF)+(-1)^{\rho}(aA+bB+bC),\\&\Phi_{\rho(\rho+1)}=\frac{1}{2}[D-F-(-1)^{\rho}B+(-1)^{\rho}C]\end{aligned}\tag{3.112}$$

为了把 $\Phi_{\rho\lambda}$ 组合成属确定不可约表示的矢量基 $\phi^{j}_{\rho\lambda}$，大致有两种方法. 第一种方法适合于比较简单的群，而第二种方法更普遍一些.

由于 D_3 群比较简单，可用第一种方法. 从式 (3.111) 可知，下标为 (0 1) 和 (1 0) 的不可约基是唯一的，因而精确到系数，这基可由式 (3.112) 确定下来. 由于式 (3.108)，这些基是互相关联的，我们先定出其中的一个

$$\phi^{E}_{10}=\Phi_{10}=\frac{1}{2}(D-F+B-C)\tag{3.113}$$

代入式 (3.108)，应用 $D^{E}(D)$ 的具体形式，得

$$D\phi^{E}_{10}=-\frac{\sqrt{3}}{2}\phi^{E}_{00}-\frac{1}{2}\phi^{E}_{10}$$

利用乘法表算得

$$\begin{aligned}\phi^{E}_{00}&=-\frac{2}{\sqrt{3}}\left\{D\phi^{E}_{10}+\frac{1}{2}\phi^{E}_{10}\right\}\\&=-\frac{1}{2\sqrt{3}}\{2(F-E+C-A)+(D-F+B-C)\}\\&=\frac{1}{2\sqrt{3}}\{2E-D-F+2A-B-C\}\end{aligned}\tag{3.114}$$

再代入式 (3.108)，得

$$\phi^{E}_{00}D=-\frac{1}{2}\phi^{E}_{00}+\frac{\sqrt{3}}{2}\phi^{E}_{01},\qquad \phi^{E}_{10}D=-\frac{1}{2}\phi^{E}_{10}+\frac{\sqrt{3}}{2}\phi^{E}_{11}$$

利用乘法表算得

$$\begin{aligned}\phi^{E}_{01}&=\frac{2}{\sqrt{3}}\left\{\phi^{E}_{00}D+\frac{1}{2}\phi^{E}_{00}\right\}\\&=\frac{1}{6}\{2(2D-F-E+2C-A-B)+(2E-D-F+2A-B-C)\}\\&=\frac{1}{2}\{D-F-B+C\}\\\phi^{E}_{11}&=\frac{2}{\sqrt{3}}\left\{\phi^{E}_{10}D+\frac{1}{2}\phi^{E}_{10}\right\}\\&=\frac{1}{2\sqrt{3}}\{2(F-E+A-B)+(D-F+B-C)\}\\&=\frac{1}{2}\{-2E+D+F+2A-B-C\}\end{aligned}\tag{3.115}$$

最后, 由正交归一性算得 ϕ_{00}^{A} 和 ϕ_{11}^{B} 在表达式 (3.112) 中的系数为 $a=b=1/\sqrt{6}$, 则得

$$\begin{aligned}\phi_{00}^{A} &= \frac{1}{\sqrt{6}}\{E+D+F+A+B+C\} \\ \phi_{11}^{B} &= \frac{1}{\sqrt{6}}\{E+D+F-A-B-C\}\end{aligned} \tag{3.116}$$

如果 $\varPhi_{\rho\lambda}$ 的下标没有不简并的情况, 就必须采用第二种方法. 例如, 式 (3.112) 算得的 $\varPhi_{00}$ 有两个线性无关的矢量, 它们分属不可约表示 D^{A} 和 D^{E}, 需要找一个算符把它们区分开来. 对 D_3 群, 可选择二次轴转动元素之和 $W=A+B+C$, 它在三个不可约表示 D^{A}, D^{B} 和 D^{E} 中的表示矩阵都是常数矩阵, 常数分别取 3, -3 和 0. 现在把 W 作用在两个线性无关的矢量 $\varPhi_{\rho\rho}$ 上. 由式 (3.112) 和乘法表得

$$\begin{aligned}&\varPhi_{\rho\rho}^{(1)}=E+(-1)^{\rho}A, \qquad \varPhi_{\rho\rho}^{(2)}=(D+F)+(-1)^{\rho}(B+C) \\ &W\varPhi_{\rho\rho}^{(1)}=(A+B+C)+(-1)^{\rho}(E+D+F)=(-1)^{\rho}\varPhi_{\rho\rho}^{(1)}+(-1)^{\rho}\varPhi_{\rho\rho}^{(2)} \\ &W\varPhi_{\rho\rho}^{(2)}=2(A+B+C)+(-1)^{\rho}2(E+D+F)=2(-1)^{\rho}\varPhi_{\rho\rho}^{(1)}+2(-1)^{\rho}\varPhi_{\rho\rho}^{(2)}\end{aligned} \tag{3.117}$$

就是说, W 关于这两个基的矩阵形式为

$$(-1)^{\rho}\begin{pmatrix}1 & 2\\ 1 & 2\end{pmatrix}$$

本征值为 $3(-1)^{\rho}$ 和 0, 相应的本征矢量为

$$\varPhi_{\rho\rho}^{(1)}+\varPhi_{\rho\rho}^{(2)}, \qquad 2\varPhi_{\rho\rho}^{(1)}-\varPhi_{\rho\rho}^{(2)}$$

归一化后, 得

$$\begin{aligned}&\phi_{00}^{A}=\frac{1}{\sqrt{6}}\left\{\varPhi_{00}^{(1)}+\varPhi_{00}^{(2)}\right\}=\frac{1}{\sqrt{6}}\{E+D+F+A+B+C\} \\ &\phi_{11}^{B}=\frac{1}{\sqrt{6}}\left\{\varPhi_{00}^{(1)}-\varPhi_{00}^{(2)}\right\}=\frac{1}{\sqrt{6}}\{E+D+F-A-B-C\} \\ &\phi_{00}^{E}=\frac{1}{2\sqrt{3}}\left\{2\varPhi_{00}^{(1)}-\varPhi_{00}^{(2)}\right\}=\frac{1}{2\sqrt{3}}\{2E-D-F+2A-B-C\} \\ &\phi_{11}^{E}\sim 2\varPhi_{11}^{(1)}-\varPhi_{11}^{(2)}=2E-D-F-2A+B+C\end{aligned} \tag{3.118}$$

由于式 (3.108), ϕ_{11}^{E} 和 ϕ_{00}^{E} 有关联, ϕ_{11}^{E} 的系数待定. 类似式 (3.114) 的计算, 由式 (3.108) 得

$$D\phi_{00}^{E}=-\frac{1}{2}\phi_{00}^{E}+\frac{\sqrt{3}}{2}\phi_{10}^{E}$$

利用乘法表算得

$$\begin{aligned}\phi^E_{10} &= \frac{2}{\sqrt{3}}\left\{D\phi^E_{00}+\frac{1}{2}\phi^E_{10}\right\}\\ &= \frac{1}{6}\left\{2\left(2D-F-E+2B-C-A\right)+\left(2E-D-F+2A-B-C\right)\right\}\\ &= \frac{1}{2}\left\{D-F+B-C\right\}\end{aligned} \tag{3.119}$$

再用式 (3.115) 计算 ϕ^E_{01} 和 ϕ^E_{11}.

从 D_3 群群代数不可约基的计算中, 可以归纳出有限群 G 群代数不可约基的一般计算方法. 首先, 在群 G 中选择一个 (或几个) 生成元, 用 A 来代表, 让它在不可约表示中的表示矩阵取对角形式. 设 A 的阶数为 a, 则表示矩阵的对角元只能取 $\eta = e^{-i2\pi/a}$ 的幂次 $\rho \bmod a$. 对已知的点群, 这幂次已足够区分每一个不可约表示的行 (列), 可用来作为群代数中不可约基 $\phi^j_{\rho\lambda}$ 的下标. 对更复杂的有限群, 如置换群, 需要专门的方法处理.

其次, 也是最重要的一步, 在 G 的群代数中, 找出左乘 A 和右乘 A 共同的本征矢量 $\Phi^{(r)}_{\rho\lambda}$

$$A\Phi^{(r)}_{\rho\lambda}=\eta^\rho, \qquad \Phi^{(r)}_{\rho\lambda}A=\eta^\lambda\Phi^{(r)}_{\rho\lambda}, \qquad r=1,2,\cdots \tag{3.120}$$

对阶数较低的群, 如 D_3 群, 我们采用把 A 在正则表示中的表示矩阵对角化的方法计算. 对较复杂的群, 就需要用下一小节介绍的投影算符方法.

第三, 在 G 的群代数中, A 的各本征值的本征矢量 $\Phi^{(r)}_{\rho\lambda}$ 经常都是简并的, 需要把这些本征矢量区分开来, 分属到各不等价不可约表示中去. 把类 $\mathcal{C}_\alpha$ 中元素之和 W_α 称为类算符. 它在不可约表示中的表示矩阵 $D^j(W_\alpha)$ 定义为类中元素表示矩阵之和. 由舒尔定理可以证明 (见习题第 7 题), W_α 在不可约表示 D^j 中的表示矩阵是常数矩阵

$$D^j(W_\alpha)=\sum_{S\in\mathcal{C}_\alpha}D^j(S)=\frac{n(\alpha)\chi^j_\alpha}{m_j}\,\mathbf{1} \tag{3.121}$$

其中, $n(\alpha)$ 是类 $\mathcal{C}_\alpha$ 中包含元素数目, χ^j_α 是类 $\mathcal{C}_\alpha$ 在表示 D^j 中的特征标, m_j 是表示 D^j 的维数. 选择一个 (或几个) 类 $\mathcal{C}_\alpha$ 的类算符 W_α, 要求它在各不可约表示中的取值不一样, 对已知的点群, 这是可以做到的. 对给定的 ρ 和 λ, 计算算符 W_α 在 $\Phi^{(r)}_{\rho\lambda}$ 中的矩阵形式, 对角化这矩阵, 计算得的新基就正比于群代数的不可约基. 简言之, 群代数的不可约基就是 A 和 W_α 的共同本征矢量.

最后, 群代数不可约基 $\phi^j_{\rho\lambda}$ 是作为 A 和 W_α 的共同本征矢量计算出来的, 它们都允许乘一个任意常数. 如果群 G 的不等价不可约表示的标准形式已经知道, 则根据式 (3.108), 就可以确定新基的可乘常数. 对每一个不可约表示 D^j, 不可约基中有一个公共因子是未定的, 可以按照实际问题的方便选定. 即对每一个 j 选定一个基

$\phi^j_{\rho\lambda}$ 的系数, 通常要求 $\phi^j_{\rho\lambda}$ 归一化, 系数尽量简单等. 如果群 G 的不等价不可约表示的标准形式还不知道, 可以对每一个给定的 j 值, 任取一个 λ 值, 按照归一化的条件, 选定 m_j 个 $\phi^j_{\rho\lambda}$ 的系数, 并通过式 (3.108) 计算其他生成元 B 在表示 D^j 中的表示矩阵 $D^j(B)$. 这种规定属于表象的选择. 当然, 系数的选择应该照顾到表示矩阵 $D^j(B)$ 的形式尽量简单.

三、投影算符

式 (3.107) 用 X 矩阵把群元素组合成新基 $\phi^j_{\mu r}$, 它的逆变换把新基组合成群元素

$$R = \sum_{k\nu r} \phi^k_{\nu r} \left(X^{-1}\right)_{k\nu r, R} \tag{3.122}$$

R 包含属各不等价不可约表示各行的基. 我们希望找一个投影算符 P^j_μ, 把 R 中属确定不可约表示 D^j 确定行 μ 的基找出来, 即

$$P^j_\mu P^k_\nu = \delta_{jk}\delta_{\mu\nu} P^j_\mu \ , \qquad P^j_\mu R = \sum_r \phi^j_{\mu r} \left(X^{-1}\right)_{j\mu r, R} \tag{3.123}$$

定理七 对有限群 G, 满足式 (3.123) 的投影算符取如下形式

$$P^j_\mu = \frac{m_j}{g} \sum_{S\in G} D^j_{\mu\mu}(S)^* S \tag{3.124}$$

其中, m_j 是表示 D^j 的维数, g 是群 G 的阶数. 这是作用在群代数中的投影算符形式, 如果作用在一般标量函数空间, 元素 S 换成算符 P_S.

证明 利用正交关系式 (3.38), 直接计算就可证明式 (3.124) 满足式 (3.123)

$$\begin{aligned}
P^j_\mu P^k_\nu &= \frac{m_j m_k}{g^2} \sum_{R\in G}\sum_{S\in G} D^j_{\mu\mu}(S)^* D^k_{\nu\nu}(R)^* SR \\
&= \frac{m_j m_k}{g^2} \sum_{T\in G}\sum_{S\in G} D^j_{\mu\mu}(S)^* \sum_\rho D^k_{\rho\nu}(S) D^k_{\rho\nu}(T)^* T \\
&= \delta_{jk}\delta_{\mu\nu} \frac{m_j}{g} \sum_{T\in G} D^j_{\mu\mu}(T)^* T = \delta_{jk}\delta_{\mu\nu} P^j_\mu \\
P^j_\mu R &= \frac{m_j}{g} \sum_{S\in G} D^j_{\mu\mu}(S)^* \sum_{k\nu r} S\phi^k_{\nu r} \left(X^{-1}\right)_{k\nu r, R} \\
&= \frac{m_j}{g} \sum_{k\nu r\rho}\sum_{S\in G} D^j_{\mu\mu}(S)^* D^k_{\rho\nu}(S) \phi^k_{\rho r} \left(X^{-1}\right)_{k\nu r, R} \\
&= \sum_r \phi^j_{\mu r} \left(X^{-1}\right)_{j\mu r, R}
\end{aligned}$$

证完.

做几点说明. 首先, 把投影算符相加, 可得关于确定不可约表示的投影算符

$$\begin{aligned} &P^j = \sum_{\mu} P^j_{\mu} = \frac{m_j}{g} \sum_{S\in G} \chi^j(S)^* S \ , \\ &P^j P^k = \delta_{jk} P^j \ , \qquad \sum_{j} P^j = \sum_{j\mu} P^j_{\mu} = E \end{aligned} \tag{3.125}$$

其次, 式 (3.123) 右边系数 $\left(X^{-1}\right)_{j\mu r,R}$ 是依赖于行指标 μ 的, 因而 $P^j_{\mu}R$ 并不构成 D^j 表示的一组标准基

$$S\left(P^j_{\mu}R\right) \neq \sum_{\nu} \left(P^j_{\nu}R\right) D^j_{\nu\mu}(S)$$

把 P^j_{μ} 稍做变化, 才能满足上述性质

$$\begin{aligned} &Q^j_{\mu\rho} = \frac{m_j}{g} \sum_{S\in G} D^j_{\mu\rho}(S)^* S \ , \qquad Q^j_{\mu\rho}R = \sum_{r} \phi^j_{\mu r} \left(X^{-1}\right)_{j\rho r,R} \ , \\ &S\left(Q^j_{\mu\rho}R\right) = \sum_{\nu} \left(Q^j_{\nu\rho}R\right) D^j_{\nu\mu}(S) \end{aligned} \tag{3.126}$$

但此时 $Q^j_{\mu\rho}$ 不再是投影算符, 它不满足 (3.123) 的第一式.

最后, 我们的任务是要计算群代数中左乘 A 和右乘 A 共同的本征矢量 $\Phi^{(r)}_{\rho\lambda}$, 其中 A 在群 G 不可约表示中的表示矩阵是对角矩阵. 设 A 的阶为 a, A 的幂次构成循环子群 H. H 是 a 阶阿贝尔群, 有 a 个不等价的一维表示 $D^{\rho}(A) = \eta^{\rho}$, $\eta = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi/a}$, $\rho =$ 整数 mod a. 采用子群 H 的投影算符 P^{ρ} 从左面和右面对群元素 R 投影, 就可以得到本征矢量 $\Phi^{(r)}_{\rho\lambda}$

$$P^{\rho} = \frac{1}{a}\sum_{t=0}^{a-1} D^{\rho}(A^t)^* A^t = \frac{1}{a}\sum_{t=0}^{a-1} \eta^{-\rho t} A^t, \qquad \Phi^{(r)}_{\rho\lambda} = P^{\rho} R P^{\lambda} \tag{3.127}$$

先选 R 为恒元 E, 算得第一组本征矢量 $\Phi^{(1)}_{\rho\lambda}$, 它是群元素的线性组合. 在不参与这组合的元素中再任选元素 S, 计算第二组本征矢量 $\Phi^{(2)}_{\rho\lambda}$. 以此类推, 直到所有群元素都出现在这些本征矢量 $\Phi^{(r)}_{\rho\lambda}$ 中为止. 注意, 在组合 $\Phi^{(r)}_{\rho\lambda} = P^{\rho}RP^{\lambda}$ 中如果出现元素 S, 则 S 一定正比于 $A^{\rho}RA^{t}$. 用 S 代替式 (3.127) 中的 R, 算出来的 $P^{\rho}SP^{\lambda}$ 最多只能与 $\Phi^{(r)}_{\rho\lambda}$ 相差一个系数.

四、T 群群代数的不可约基

用投影算符方法计算 T 群群空间的不可约基. 2.5 节中介绍过 T 群的基本性质: T 群是正四面体的固有对称变换群, 包含 12 个元素, 四个类, 乘法表由表 2.9 给出, 特征标表由表 3.8 给出. 生成元取沿 z 轴的二次轴转动 T_z^2 和沿 $(\boldsymbol{e}_1+\boldsymbol{e}_2+\boldsymbol{e}_3)/\sqrt{3}$ 方向的三次轴转动 R_1. T 群有一个不变子群 D_2, 它由恒元和三个沿坐标轴方向的

二次轴转动构成, 商群同构于 C_3 群. 商群的表示给出 T 群三个不等价的一维表示. T 群还有一个三维不可约表示 D^T, 表示矩阵由式 (3.59) 给出, 其中生成元 T_z^2 是对角化的.

因为 T_z^2 的阶数为 2, 它的本征值不足以区分三维表示的行 (列), 所以改变表象, 就是做相似变换 X 使 $\overline{D}(R_1) = X^{-1}D(R_1)X$ 对角化

$$
\begin{aligned}
&X = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 & \omega^2 & \omega \\ 1 & \omega & \omega^2 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \qquad X^{-1} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \omega & \omega^2 & 1 \\ \omega^2 & \omega & 1 \end{pmatrix} \\
&\overline{D}^T(R_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \omega & 0 \\ 0 & 0 & \omega^2 \end{pmatrix}, \qquad \overline{D}^T(T_z^2) = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{3.128}
$$

其中, $\omega = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi/3}$.

R_1 是三阶元素, 本征值是 ω^ρ, $\rho = 0, 1, 2 \bmod 3$. 用这幂次 ρ 来标记不可约表示的行 (列) 指标, 群代数的不可约基为 ϕ_{00}^A, ϕ_{11}^E, $\phi_{22}^{E'}$ 和 $\phi_{\rho\lambda}^T$, 其中表示 D^T 的行 (列) 指标排列为 0, 1, 2. 先用投影算符 P^ρ 计算左乘和右乘 R_1 的共同本征函数 $\Phi_{\rho\lambda}^{(r)}$

$$
\begin{aligned}
&R_1\Phi_{\rho\lambda}^{(r)} = \omega^\rho\Phi_{\rho\lambda}^{(r)}, \qquad \Phi_{\rho\lambda}^{(r)}R_1 = \omega^\lambda\Phi_{\rho\lambda}^{(r)} \\
&P^\rho = \left\{E + \omega^{-\rho}R_1 + \omega^\rho R_1^2\right\}/3, \qquad \Phi_{\rho\lambda}^{(r)} = 9P^\rho R P^\lambda
\end{aligned}
$$

其中, 因子 9 是为了使公式简洁. 取 R 为恒元 E, 得

$$
\begin{aligned}
\Phi_{\rho\lambda}^{(1)} &= 9P^\rho E P^\lambda = \left(1 + \omega^{\lambda-\rho} + \omega^{\rho-\lambda}\right)\left\{E + R_1\omega^{-\rho} + R_1^2\omega^\rho\right\} \\
&= 3\delta_{\rho\lambda}\left\{E + R_1\omega^{-\rho} + R_1^2\omega^\rho\right\}
\end{aligned}
\tag{3.129}
$$

再选 R 为元素 T_z^2, 应用 T 群的乘法表 2.9, 得

$$
\begin{aligned}
\Phi_{\rho\lambda}^{(2)} &= 9P^\rho T_z^2 P^\lambda = T_z^2 + \omega^{-\lambda}T_z^2R_1 + \omega^\lambda T_z^2R_1^2 \\
&\quad + \omega^{-\rho+\lambda}R_1T_z^2R_1^2 + \omega^{-\rho}R_1T_z^2 + \omega^{-\rho-\lambda}R_1T_z^2R_1 \\
&\quad + \omega^{\rho-\lambda}R_1^2T_z^2R_1 + \omega^{\rho+\lambda}R_1^2T_z^2R_1^2 + \omega^\rho R_1^2T_z^2 \\
&= \left\{T_z^2 + \omega^{-\lambda}R_2 + \omega^\lambda R_4^2\right\} + \omega^{\lambda-\rho}\left\{T_x^2 + \omega^{-\lambda}R_4 + \omega^\lambda R_3^2\right\} \\
&\quad + \omega^{\rho-\lambda}\left\{T_y^2 + \omega^{-\lambda}R_3 + \omega^\lambda R_2^2\right\}
\end{aligned}
\tag{3.130}
$$

在这两组函数基展开式中已出现群 T 的全部元素, 再把投影算符作用在其他群元素上, 不会产生独立的新函数.

其次, 选择类算符 $W = R_1 + R_2 + R_3 + R_4$, 根据特征标表 3.8, W 在不可约表示 A, E, E' 和 T 中分别取值为 4, 4ω, $4\omega^2$ 和 0. 现在对确定的下标 ρ 和 λ, 计算 W

在波函数 $\Phi_{\rho\lambda}^{(r)}$ 中的矩阵形式和本征矢量. 由于函数基的完备性, 计算中我们只需要列出 E 和 T_z^2 的项就够了

$$
\begin{aligned}
W\Phi_{\rho\rho}^{(1)} &= 3\omega^{\rho}\left\{E+T_z^2\right\}+\cdots=\omega^{\rho}\left\{\Phi_{\rho\rho}^{(1)}+3\Phi_{\rho\rho}^{(2)}\right\},\\
W\Phi_{\rho\lambda}^{(2)} &= \left\{E+T_z^2\right\}\omega^{\lambda}\left\{1+\omega^{\lambda-\rho}+\omega^{\rho-\lambda}\right\}+\cdots\\
&= \delta_{\rho\lambda}\omega^{\rho}\left\{\Phi_{\rho\rho}^{(1)}+3\Phi_{\rho\rho}^{(2)}\right\}
\end{aligned}
$$

当 $\rho=\lambda$ 时, W 在此函数基中的矩阵形式为

$$
\omega^{\rho}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 3 & 3\end{pmatrix}
$$

本征值为 $4\omega^{\rho}$ 和 0, 对应的本征矢量的转置分别为 $(1,3)$ 和 $(1,-1)$, 由此组合出分属表示 A, E, E' 和 T 的本征函数

$$
\begin{aligned}
\phi^{A} &= c_A\left\{\Phi_{00}^{(1)}+3\Phi_{00}^{(2)}\right\}=3c_A\left\{E+T_x^2+T_y^2+T_z^2\right.\\
&\qquad \left.+R_1+R_4+R_3+R_2+R_1^2+R_3^2+R_2^2+R_4^2\right\},\\
\phi^{E} &= c_E\left\{\Phi_{11}^{(1)}+3\Phi_{11}^{(2)}\right\}=3c_E\left\{E+T_x^2+T_y^2+T_z^2\right.\\
&\qquad \left.+\omega^2\left(R_1+R_4+R_3+R_2\right)+\omega\left(R_1^2+R_3^2+R_2^2+R_4^2\right)\right\},\\
\phi^{E'} &= c_{E'}\left\{\Phi_{22}^{(1)}+3\Phi_{22}^{(2)}\right\}=3c_{E'}\left\{E+T_x^2+T_y^2+T_z^2\right.\\
&\qquad \left.+\omega\left(R_1+R_4+R_3+R_2\right)+\omega^2\left(R_1^2+R_3^2+R_2^2+R_4^2\right)\right\},\\
\phi_{00}^{T} &= c_{00}\left\{\Phi_{00}^{(1)}-\Phi_{00}^{(2)}\right\}=c_{00}\left\{3E-T_x^2-T_y^2-T_z^2\right.\\
&\qquad \left.+3R_1-R_4-R_3-R_2+3R_1^2-R_3^2-R_2^2-R_4^2\right\},\\
\phi_{11}^{T} &= c_{11}\left\{\Phi_{11}^{(1)}-\Phi_{11}^{(2)}\right\}=c_{11}\left\{3E-T_x^2-T_y^2-T_z^2\right.\\
&\qquad \left.+\omega^2\left(3R_1-R_4-R_3-R_2\right)+\omega\left(3R_1^2-R_3^2-R_2^2-R_4^2\right)\right\},\\
\phi_{22}^{T} &= c_{22}\left\{\Phi_{22}^{(1)}-\Phi_{22}^{(2)}\right\}=c_{22}\left\{3E-T_x^2-T_y^2-T_z^2\right.\\
&\qquad \left.+\omega\left(3R_1-R_4-R_3-R_2\right)+\omega^2\left(3R_1^2-R_3^2-R_2^2-R_4^2\right)\right\}
\end{aligned}
\tag{3.131}
$$

当 $\rho\neq\lambda$ 时, 分别只有一个基 $\Phi_{\rho\lambda}^{(2)}$, 它们都属于表示 T

$$
\begin{aligned}
\phi_{10}^{T} &= c_{10}\left\{T_z^2+R_2+R_4^2+\omega^2\left(T_x^2+R_4+R_3^2\right)+\omega\left(T_y^2+R_3+R_2^2\right)\right\},\\
\phi_{20}^{T} &= c_{20}\left\{T_z^2+R_2+R_4^2+\omega\left(T_x^2+R_4+R_3^2\right)+\omega^2\left(T_y^2+R_3+R_2^2\right)\right\},\\
\phi_{01}^{T} &= c_{01}\left\{T_z^2+\omega^2R_2+\omega R_4^2+\omega T_x^2+R_4+\omega^2R_3^2+\omega^2T_y^2+\omega R_3+R_2^2\right\},\\
\phi_{21}^{T} &= c_{21}\left\{T_z^2+\omega^2R_2+\omega R_4^2+\omega^2T_x^2+\omega R_4+R_3^2+\omega T_y^2+R_3+\omega^2R_2^2\right\},\\
\phi_{02}^{T} &= c_{02}\left\{T_z^2+\omega R_2+\omega^2R_4^2+\omega^2T_x^2+R_4+\omega R_3^2+\omega T_y^2+\omega^2R_3+R_2^2\right\},\\
\phi_{12}^{T} &= c_{12}\left\{T_z^2+\omega R_2+\omega^2R_4^2+\omega T_x^2+\omega^2R_4+R_3^2+\omega^2T_y^2+R_3+\omega R_2^2\right\}
\end{aligned}
\tag{3.132}
$$

所有这些基都是作为本征矢量引入的, 前面可乘一任意常数. 对一维表示, 这常数就是归一化因子, 可取 $c_A=c_E=c_{E'}=\sqrt{1/108}$. 但对三维表示 D^T, 9 个 $\phi_{\rho\lambda}^{T}$ 是互

相关联的, 只有一个系数可用归一化条件来定出, 如取 $c_{00} = 1/6$, 其他系数需用下面公式计算

$$T_z^2\phi_{\rho\lambda}^T = \sum_{\mu} \phi_{\mu\lambda}^T \overline{D}_{\mu\rho}^T(T_z^2), \qquad \phi_{\rho\lambda}^T T_z^2 = \sum_{\nu} \overline{D}_{\lambda\nu}^T(T_z^2)\phi_{\rho\nu}^T \tag{3.133}$$

由于基是完备的, 计算中只需列出 E, T_x^2, T_y^2 和 T_z^2 的项. 由

$$T_z^2\phi_{00}^T = \left\{-E - T_x^2 - T_y^2 + 3T_z^2 + \cdots\right\}/6 = \left\{-\phi_{00}^T + 2\phi_{10}^T + 2\phi_{20}^T\right\}/3$$

定出 $c_{10} = c_{20} = 1/3$. 再由

$$\begin{aligned}
\phi_{00}^T T_z^2 &= \left\{-E - T_x^2 - T_y^2 + 3T_z^2 + \cdots\right\}/6 = \left\{-\phi_{00}^T + 2\phi_{01}^T + 2\phi_{02}^T\right\}/3, \\
\phi_{10}^T T_z^2 &= \left\{E + \omega T_x^2 + \omega^2 T_y^2 + \cdots\right\}/3 = \left\{-\phi_{10}^T + 2\phi_{11}^T + 2\phi_{12}^T\right\}/3, \\
\phi_{20}^T T_z^2 &= \left\{E + \omega^2 T_x^2 + \omega T_y^2 + \cdots\right\}/3 = \left\{-\phi_{20}^T + 2\phi_{21}^T + 2\phi_{22}^T\right\}/3
\end{aligned}$$

定出 $c_{01} = c_{02} = c_{12} = c_{21} = 1/3$ 和 $c_{11} = c_{22} = 1/6$. 对三维不可约表示, 如果取式 (3.59) 的表象 $D^T(R)$, 则不可约基 $\phi_{\rho\lambda}^T$ 需做逆相似变换 X^{-1}

$$\psi_{\mu\nu}^T = \sum_{\rho\lambda} X_{\nu\lambda}\phi_{\rho\lambda}^T \left(X^{-1}\right)_{\rho\mu} = \sum_{\rho\lambda} X_{\mu\rho}^* \phi_{\rho\lambda}^T \left(X^{-1}\right)_{\lambda\nu}^* \tag{3.134}$$

实际计算时可分两步来组合, 最后结果是

$$\begin{aligned}
&\psi_{00}^T = \left\{E + T_x^2 - T_y^2 - T_z^2\right\}/2, &&\psi_{01}^T = \left\{R_1^2 - R_2^2 + R_3^2 - R_4^2\right\}/2, \\
&\psi_{10}^T = \left\{R_1 - R_2 + R_3 - R_4\right\}/2, &&\psi_{11}^T = \left\{E - T_x^2 + T_y^2 - T_z^2\right\}/2, \\
&\psi_{20}^T = \left\{R_1^2 - R_2^2 - R_3^2 + R_4^2\right\}/2, &&\psi_{21}^T = \left\{R_1 + R_2 - R_3 - R_4\right\}/2, \\
&\psi_{02}^T = \left\{R_1 - R_2 - R_3 + R_4\right\}/2, && \\
&\psi_{12}^T = \left\{R_1^2 + R_2^2 - R_3^2 - R_4^2\right\}/2, && \\
&\psi_{22}^T = \left\{E - T_x^2 - T_y^2 + T_z^2\right\}/2 &&
\end{aligned} \tag{3.135}$$

关于 O 群和 I 群群空间的不可约基请参看附录 5 和附录 6.

习 题

1. 设 G 是一个非阿贝尔群, $D(G)$ 是群 G 的一个不可约真实表示, 元素 R 的表示矩阵为 $D(R)$. 现让群 G 元素 R 分别与下列矩阵对应, 问此矩阵的集合是否构成群 G 的表示? 若是表示, 是否真实表示? (1) $D(R)^\dagger$; (2) $D(R)^T$; (3) $D(R^{-1})$; (4) $D(R)^*$; (5) $D(R^{-1})^\dagger$; (6) $\det D(R)$; (7) $\mathrm{Tr}\, D(R)$. 例如, 第一小题, 设 $R \longleftrightarrow D(R)^\dagger$, 问 $D(R)^\dagger$ 的集合 $D(G)^\dagger$ 是否构成群 G 的表示?

2. 证明有限群任何一维表示的表示矩阵模为 1.

3. 证明阿贝尔群 (包括无限群) 的不可约表示都是一维的.

4. 证明有限群两个等价的不可约幺正表示之间的相似变换矩阵, 如果限制其行列式为 1, 必为幺正矩阵.

5. 证明除恒等表示外, 有限群任一不可约表示的特征标对群元素求和为零.

6. 有限群群代数中, 右乘群元素产生的表示 $\overline{D}(G)$[见式 (3.11)] 与正则表示等价. 试具体计算 D_3 群群代数中, 左乘和右乘群元素产生的这两个表示间的相似变换矩阵. 能不能把此方法推广, 对一般的有限群, 计算这样两个表示间的相似变换矩阵?

7. 设有限群 G 的类 $\mathcal{C}_\alpha$ 包含 $n(\alpha)$ 个元素, 在群代数中这些元素之和记作 W. 设 $D^j(G)$ 是群 G 的不可约表示, 维数为 m_j, 类 $\mathcal{C}_\alpha$ 的特征标为 χ^j_α. 试证明 W 在此不可约表示中的表示矩阵是常数矩阵, 并计算此常数.

8. 证明有限群包含的非自逆类数目等于不等价不可约的非自共轭表示的数目, 因此自逆类的数目等于不等价不可约的自共轭表示的数目.

9. 若有限群 G 等于两子群的直乘, $G = H_1 \otimes H_2$, 证明群 G 的不等价不可约表示都可表为两子群不等价不可约表示的直乘.

10. O 群有个不变子群 D_2, 它由恒元和绕坐标轴转动 π 角的变换构成. 具体建立它的商群和 D_3 群的同构关系, 并由此计算 O 群二维不可约表示的特征标和生成元的表示矩阵.

11. 试用分导表示的方法, 计算立方体固有对称群 O 的特征标表.

12. 计算 T 群三维不可约表示 D^T 自直乘约化的相似变换矩阵 X

$$X^{-1}\left\{D^T(R) \times D^T(R)\right\} X = \sum_j a_j D^j(R) \ .$$

13. 根据 I 群的特征标表 3.14, 计算下列直乘表示约化的克莱布施 – 戈登级数: (1) $D^H \times D^H$; (2) $D^G \times D^H$; (3) $D^G \times D^G$; (4) $D^{T_1} \times D^{T_1}$; (5) $D^{T_1} \times D^{T_2}$; (6) $D^{T_1} \times D^H$; (7) $D^{T_1} \times D^G$.

14. 试计算第二章习题 15 给出的群的特征标表.

15. 分别计算 I 群各不可约表示关于子群 C_5, D_5 和 T 的分导表示, 按子群不可约表示约化的克莱布施 – 戈登级数.

16. 计算 I 型非固有点群 I_h 正则表示关于子群 C_{5i}, D_{5d} 和 T_h 的分导表示, 按子群不可约表示约化的克莱布施 – 戈登级数.

17. 设 D_3 群元素是在二维空间中的坐标变换

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} , \qquad R \in D_3$$

取生成元 D 和 A, 它们的变换矩阵正是它们在二维表示 $D^E(D_3)$ 中的表示矩阵

$$D = D^E(D) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix} , \qquad A = D^E(A) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

已知下列函数基架设的四维函数空间对 D_3 群保持不变

$$\psi_1(x,y) = x^3 , \qquad \psi_2(x,y) = x^2 y , \qquad \psi_3(x,y) = xy^2 , \qquad \psi_4(x,y) = y^3$$

试计算 D_3 群在此空间关于这组函数基的线性表示, 即计算 D_3 群生成元在此表示中的表示矩阵. 然后, 把此表示约化为 D_3 群不可约表示的直和, 把此函数基组合为分属各不等价不可约表示的函数基.

第四章　三维转动群

球对称是物理学中最常见的对称性, 无论在经典力学中还是在量子力学中, 中心力场 (球对称系统) 问题总是最基本的研究课题. 这不仅是因为中心力场问题容易处理, 而且很多真实物理系统都有近似的球对称性质. 在球对称的系统里空间各向同性, 系统绕通过原点的任何轴的任何转动都保持不变, 因而系统的对称变换群是三维空间转动群. 它是无限群, 群中元素可用一组实参数来描写, 实参数在一定区域内连续变化, 且涉及的这些连续参数的函数都是解析函数. 因此转动群是连续群, 而且是连续群中可以用微积分方法深入研究的一类群, 称为李群. 三维空间转动群是最简单的李群. 对转动群的深入研究会给李群的一般研究提供很多启示. 总之, 三维空间转动群的研究在物理上和数学上都有重要意义.

在这一章里, 我们将结合转动群介绍李群的基本知识, 通过转动群和二维幺正矩阵群的同态关系, 讲解覆盖群和多值表示的概念, 在二维幺正矩阵群的不变函数空间中找出三维转动群的所有单值和双值不等价不可约表示, 计算三维转动群不可约表示的直乘分解及其克莱布施 – 戈登系数, 从变换的角度引进张量和旋量的概念, 最后举一些群论方法在物理中应用的实例.

4.1　三维空间转动变换

描述转动变换, 存在两种不同的观点, 一种是系统转动的观点, 另一种是坐标系转动的观点. 采用不同的观点, 虽然给出的物理结果是一致的, 但公式表达方式有所不同, 不能混淆. 本书按照多数文献的习惯, 采用系统转动的观点. 在群论中矢量这一术语用得比较广泛, 有线性空间的矢量, 群空间的矢量等. 本章研究的矢量是我们在其中生活的三维空间的矢量, 为区别起见, 对这三维空间的矢量, 我们专门用带箭头的符号来标记, 除矢量基外的单位矢量则用带小尖角的符号标记.

在三维空间建立直角坐标系 K, 用原点 O 到空间任意点 P 的位置矢量 $\vec{r}$ 来描写 P 点的位置. 坐标轴向的单位矢量记作 $\vec{e}_a$, $a = 1,\ 2,\ 3$, 则

$$\vec{r} = \sum_{a=1}^{3} \vec{e}_a x_a \tag{4.1}$$

三个坐标 x_a 作为一个整体, 与 $\vec{r}$ 一一对应. 这里坐标记作 x_a, 而不记作 x, y 和 z, 是为了写求和式的方便.

空间转动变换保持原点不变, 保持两点间距离不变, 保持手征性不变. 设转动 R 把 P 点转到 P' 点, 变换前后的坐标可用 R 矩阵联系起来

$$\vec{r'} = \sum_{a=1}^{3} \vec{e}_a x'_a$$

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \tag{4.2}$$

坐标间的齐次变换保证原点位置不变, 而距离不变性要求 R 是实正交矩阵

$$\underline{x}'^T \ \underline{x}' = \underline{x}^T \ R^T R \ \underline{x} = \underline{x}^T \ \underline{x} \ , \qquad R^T R = \mathbf{1} \tag{4.3}$$

建立固定在系统上的坐标系 K', 单位矢量为 $\vec{e'}_a$, 则 $\vec{r'}$ 在动坐标系 K' 中的分量保持不变

$$\vec{r'} = \sum_{a=1}^{3} \vec{e}_a x'_a = \sum_{b=1}^{3} \vec{e'}_b x_a \tag{4.4}$$

把式 (4.2) 代入式 (4.4), 得单位矢量的变换关系

$$\vec{e'}_b = \sum_{a=1}^{3} \vec{e}_a R_{ab} \tag{4.5}$$

在线性代数里, 当基用 R 矩阵组合时, 矢量的列矩阵用 R^{-1} 矩阵组合. 这里的列矩阵仍用 R 矩阵组合, 是因为式 (4.4) 中带撇的分量与不带撇的矢量基相乘, 与线性代数中的表式正好相反.

坐标系的手征性是用单位矢量的混合积来确定的, 右手坐标系单位矢量的混合积为 1, 即

$$\vec{e}_1 \cdot (\vec{e}_2 \times \vec{e}_3) = 1 \tag{4.6}$$

左手坐标系则为 -1. 转动变换保持系统的手征性不变, 就是要求固定在系统上的坐标系, 它的单位矢量的混合积变换前后都是 1, 即

$$\vec{e'}_1 \cdot \left(\vec{e'}_2 \times \vec{e'}_3 \right) = \det R = 1 \tag{4.7}$$

因此行列式是 1 的实正交矩阵 R 描写三维空间转动变换, 所有三维空间转动变换都可以用行列式是 1 的实正交矩阵 R 来描写. 而行列式为 -1 的实正交矩阵要改变系统的手征性, 这说明此变换中包含了空间反演 σ, 是所谓的非固有转动. 事实上, 实正交矩阵的行列式只能取不连续的 1 或 -1, 分别对应固有转动和非固有转

动. 非固有转动元素是固有转动元素和空间反演 σ 的乘积, 描写转动变换后再做空间反演变换. 行列式为 1 的矩阵常称为幺模矩阵.

三维幺模实正交矩阵 $R(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$, 描写绕三维空间 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向转动 ω 角的变换, 按照矩阵的乘积规则, 它的集合构成群, 称为三维转动群, 记作 SO(3) 群, 其中 O 代表实正交矩阵, S 代表幺模. 三维转动群是空间各向同性系统的对称变换群. 如果再把空间反演变换 σ 也包括进来, 所有三维实正交矩阵的集合构成三维实正交矩阵群, 记作 O(3) 群.

研究几个特殊的转动. 图 3.1 已经研究过绕 x_3 轴转动 ω 角的变换矩阵

$$x_1' = x_1 \ \cos\omega - x_2 \ \sin\omega \ , \qquad x_2' = x_1 \ \sin\omega + x_2 \ \cos\omega \ , \qquad x_3' = x_3$$

即

$$R(\vec{e}_3,\omega) = \begin{pmatrix} \cos\omega & -\sin\omega & 0 \\ \sin\omega & \cos\omega & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{4.8}$$

利用物理中常用的泡利 (Pauli) 矩阵可把转动矩阵写成矩阵的指数函数形式

$$\begin{gathered}\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \\ \sigma_a\sigma_b = \delta_{ab}\mathbf{1} + \mathrm{i}\sum_{c=1}^{3} \epsilon_{abc}\sigma_c \ , \qquad \text{即} \ \ \sigma_a^2 = \mathbf{1}, \qquad \sigma_1\sigma_2 = \mathrm{i}\sigma_3 \ \ \text{等}, \\ \mathrm{Tr}\ \sigma_a = 0 \ , \qquad \mathrm{Tr}\,(\sigma_a\sigma_b) = 2\delta_{ab}\end{gathered} \tag{4.9}$$

矩阵的指数函数用它的级数展开来定义

$$\begin{aligned}\exp\{-\mathrm{i}\omega\sigma_2\} &= \sum_n \frac{1}{n!}\omega^n\,(-\mathrm{i}\sigma_2)^n \\ &= \mathbf{1}\left(1 - \frac{1}{2!}\omega^2 + \frac{1}{4!}\omega^4 - + \cdots\right) - \mathrm{i}\sigma_2\left(\omega - \frac{1}{3!}\omega^3 + \frac{1}{5!}\omega^5 - + \cdots\right) \\ &= \mathbf{1}\cos\omega - \mathrm{i}\sigma_2\sin\omega = \begin{pmatrix} \cos\omega & -\sin\omega \\ \sin\omega & \cos\omega \end{pmatrix}\end{aligned} \tag{4.10}$$

把 σ_2 换成 T_3 矩阵, 就可得 $R(\vec{e}_3,\omega)$ 矩阵的指数形式

$$R(\vec{e}_3,\omega) = \exp\{-\mathrm{i}\omega T_3\} = \begin{pmatrix} \cos\omega & -\sin\omega & 0 \\ \sin\omega & \cos\omega & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad T_3 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{4.11}$$

根据三个轴的循环对称性可知绕其他两轴的转动变换矩阵为

$$
\begin{aligned}
R(\vec{e}_1,\omega) &= \exp\{-\mathrm{i}\omega T_1\} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\omega & -\sin\omega \\ 0 & \sin\omega & \cos\omega \end{pmatrix}, \\
R(\vec{e}_2,\omega) &= \exp\{-\mathrm{i}\omega T_2\} = \begin{pmatrix} \cos\omega & 0 & \sin\omega \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\omega & 0 & \cos\omega \end{pmatrix}, \\
T_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \qquad T_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \mathrm{i} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\mathrm{i} & 0 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{4.12}
$$

T 矩阵的矩阵元素满足

$$
(T_a)_{bc} = -\mathrm{i}\epsilon_{abc} \tag{4.13}
$$

再引入一个特殊的转动 $S(\varphi,\theta)$, 它把 x_3 轴上的点转到 $\hat{\boldsymbol{n}}(\theta,\varphi)$ 方向, 其中 θ 和 φ 角是 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向的极角和方位角

$$
\begin{aligned}
S(\varphi,\theta) = R(\vec{e}_3,\varphi)R(\vec{e}_2,\theta) &= \begin{pmatrix} \cos\varphi\cos\theta & -\sin\varphi & \cos\varphi\sin\theta \\ \sin\varphi\cos\theta & \cos\varphi & \sin\varphi\sin\theta \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}, \\
S(\varphi,\theta)\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi\sin\theta \\ \sin\varphi\sin\theta \\ \cos\theta \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{4.14}
$$

不难验证 (见第一章习题第 3 题)

$$
\begin{aligned}
ST_3S^{-1} &= n_1T_1 + n_2T_2 + n_3T_3 = \hat{\boldsymbol{n}}\cdot\vec{T}, \\
\vec{T} &= \vec{e}_1T_1 + \vec{e}_2T_2 + \vec{e}_3T_3
\end{aligned}
\tag{4.15}
$$

绕 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向转动 ω 角的变换 $R(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$, 可以表为三个转动的乘积, 先把 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向转到 x_3 方向, 再绕 x_3 方向转动 ω 角, 最后把 x_3 方向转回到 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向. 这三个转动的乘积可以写成指数形式

$$
\begin{aligned}
R(\hat{\boldsymbol{n}},\omega) &= S(\varphi,\theta)R(\vec{e}_3,\omega)S(\varphi,\theta)^{-1} = \exp\{-\mathrm{i}\omega ST_3S^{-1}\} \\
&= \exp\{-\mathrm{i}\omega\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\vec{T}\} = \exp\left\{-\mathrm{i}\sum_{a=1}^{3}\ \omega_aT_a\right\}
\end{aligned}
\tag{4.16}
$$

$$\begin{aligned}\omega_1 &= \omega n_1 = \omega\sin\theta\cos\varphi,\\ \omega_2 &= \omega n_2 = \omega\sin\theta\sin\varphi,\\ \omega_3 &= \omega n_3 = \omega\cos\theta\end{aligned} \tag{4.17}$$

可以把三个 ω_a 看作矢量 $\vec{\omega}$ 的直角坐标, 而 ω, θ 和 φ 是它的球坐标, 它们描写了 SO(3) 群的任意元素, 即绕 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向转动 ω 角的变换. 因为绕相反方向的转动变换有如下联系

$$R(\hat{\boldsymbol{n}},\omega) = R(-\hat{\boldsymbol{n}}, 2\pi-\omega)\ , \qquad R(\hat{\boldsymbol{n}},\pi) = R(-\hat{\boldsymbol{n}},\pi) \tag{4.18}$$

所以参数 $\vec{\omega}$ 在半径为 π 的球体内连续变化, 在球面上直径两端的点代表同一个转动.

式 (4.16) 还说明, 三维转动群中转动相同角度的元素互相共轭, 三维转动群的类用转动角度 ω 来描写. 给出任意转动变换矩阵 $R(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$, 由它的矩阵迹 $(1+2\cos\omega)$ 定出转动角 ω, 它的本征值为 1 的本征矢量沿转动轴 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向.

4.2　李群的基本概念

三维转动群是最简单的李群. 本节介绍李群的一些基本概念, 会有助于进一步理解三维转动群的性质, 也为今后研究李群的一般性质打好基础.

一、李群的组合函数

三维空间转动群 SO(3) 的元素 $R(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$ 可用三个实参数来描写, 这三个参数在半径为 π 的球体内连续变化, 在球面上直径两端的点代表同一个元素. 这是最简单的一个李群.

李群是一种连续群, 它的每一个元素都可以用一组独立实参数来描写, 这组参数在欧氏空间的一定区域内连续变化. 要求在参数的变化区域内, 至少在测度不为零的区域内, 群元素和参数值有一一对应的关系. 独立实参数数目称为连续群的阶, 参数的变化区域称为群空间, 群空间的维数就是连续群的阶数 g. 所谓测度不为零的区域, 可以简单地理解为维数和群空间维数相同的区域. 边界就是测度为零的区域. 其实不难用限制群空间范围的办法, 来实现在测度不为零的区域内群元素和参数值的一一对应关系. 例如, 三维转动群的群空间取作半径为 π 的球体, 保证了球体内群元素和参数值的一一对应关系, 但在测度为零的外球面上, 直径两端的点, 即两组不同的参数值, 对应同一个群元素. 因为在群空间测度不为零区域内的点和群元素有一一对应关系, 所以也可以等价地把群空间的点直接叫成群元素.

设元素 $R\in G$, 参数为 $(r_1, r_2, \cdots, r_g)$, 简写为 $R(r_1,\ r_2,\ \cdots,\ r_g) = R(r)$. 对于群元素的乘积, $R(r)S(s) = T(t)$, g 个参数 t_j 是 $2g$ 个变量 r_i 和 s_k 的函数

$$t_j = f_j(r_1,\ \cdots,\ r_g;\ s_1,\ \cdots,\ s_g) = f_j(r;s) \tag{4.19}$$

g 个函数 $f_j(r;s)$ 称为连续群的组合函数, 它完全描写了群元素的乘积规则. 如果组合函数是解析函数, 则此连续群称为李群. 由于函数连续可微, 微积分的整套工具可以用来深入研究李群, 使李群成为至今研究最深入最成功的无限群.

作为群的组合函数, $f_j(r;s)$ 必须满足如下条件:

(1) 封闭性. 组合函数的定义域是 (群空间)×(群空间), 而值域是群空间. 至少在测度不为零的区域内, 要求 $f_j(r;s)$ 是单值解析函数.

(2) 结合律.

$$f_j\left[r;f(s;t)\right]=f_j\left[f(r;s);t\right] \ .$$

(3) 恒元的参数为 e_j, 它包含在群空间内

$$f_j(e;r)=f_j(r;e)=r_j$$

通常为方便起见, 取 $e_j=0$.

(4) R 逆元的参数记作 $\overline{r}_j$

$$f_j(\overline{r};r)=f_j(r;\overline{r})=e_j \ .$$

实际上, 即使很简单的李群, 组合函数的形式也往往相当复杂. 组合函数主要用于理论分析, 很少用来进行具体计算.

群的许多概念在李群中同样适用, 例如阿贝尔群, 子群, 陪集, 共轭元素, 类, 不变子群, 群的同构和同态, 商群, 线性表示, 等价表示, 不可约表示, 自共轭表示, 特征标等概念也都是李群的基本概念. 李群线性表示的每一个矩阵元素和特征标, 在群空间测度不为零的区域内, 都是群参数的单值解析函数.

二、李群的局域性质

在群空间中邻近的点对应的元素称为邻近的元素. 因为常把恒元的参数选为零, 恒元邻近的元素, 参数是无穷小量, 称为无穷小元素. 不要把无穷小元素看成是一个参数很小的元素. 无穷小量是一个极限过程. 无穷小元素与群元素的微分运算相联系. 李群无穷小元素的性质决定了李群的局域 (local) 性质. 无穷小元素与任意元素 R 的乘积, 是 R 的邻近元素, 参数在元素 R 参数的邻域 (adjacent) 中. 反之, R 的邻近元素和 R^{-1} 相乘, 得无穷小元素. 粗略地说, 把无穷多个无穷小元素相继乘到群元素 R 上, 在群空间表现为由元素 R 的对应点出发的一条连续曲线. 如果在群空间中代表元素 R 的点和代表恒元的点, 可以通过一条完全在群空间内的连续曲线相连结, 则 R 可表为无穷多个无穷小元素的乘积. 数学上, 元素 R 的性质可通过一个微分方程来描写. 这说明无穷小元素在李群中起着十分重要的作用.

无穷小元素 $A(\alpha)$ 与 $B(\beta)$ 相乘, 仍是无穷小元素. 恒元参数为零, α_j 和 β_j 都是无穷小量, 将乘积元素 AB 的参数按 α 和 β 做泰勒 (Taylor) 展开, 略去二级无穷

小量, 并注意 $e_j=0$, $AE=A$ 和 $EB=B$, 得

$$\begin{aligned} f_j(\alpha;\beta) &= f_j(0;0)+\sum_{k=1}^{g}\left(\alpha_k\left.\frac{\partial f_k(\alpha;0)}{\partial\alpha_k}\right|_{\alpha=0}+\beta_k\left.\frac{\partial f_k(0;\beta)}{\partial\beta_k}\right|_{\beta=0}\right) \\ &= \alpha_j+\beta_j \end{aligned} \tag{4.20}$$

可见, 无穷小元素相乘, 参数相加. 互逆的无穷小元素的参数互为相反数. 记 A^{-1} 的参数为 $\overline{\alpha}_j$, 则

$$\overline{\alpha}_j=-\alpha_j \tag{4.21}$$

无穷小元素乘积满足交换律, 并不意味着群中所有元素乘积都满足交换律. 在理论力学中学过, 无穷小转动乘积次序可以交换, 但有限转动乘积次序不能交换, 即三维转动群不是阿贝尔群.

三、生成元和微量算符

无穷小元素在李群中处于特殊重要的地位. 现在来研究无穷小元素在变换算符群 P_G 和线性表示 $D(G)$ 中的性质.

P_R 是元素 R 对应的标量函数变换算符

$$P_R\psi(x)=\psi(R^{-1}x)$$

其中, x 代表系统所有自由度的坐标. 取 R 为无穷小元素 $A(\alpha)$, 将上式按参数 α_j 展开, 取到一级无穷小量

$$\begin{aligned} P_A\psi(x) &= \psi(x)+\sum_{aj}\overline{\alpha}_j\left.\frac{\partial(A^{-1}x)_a}{\partial\overline{\alpha}_j}\right|_{\overline{\alpha}=0}\left.\frac{\partial\psi(A^{-1}x)}{\partial(A^{-1}x)_a}\right|_{\overline{\alpha}=0} \\ &= \psi(x)-\mathrm{i}\sum_{j=1}^{g}\alpha_j\left(-\mathrm{i}\sum_a\left.\frac{\partial(Ax)_a}{\partial\alpha_j}\right|_{\alpha=0}\frac{\partial}{\partial x_a}\right)\psi(x) \end{aligned}$$

引入 g 个微量微分算符 $I_j^{(0)}$, 它们线性无关

$$\begin{aligned} I_j^{(0)} &= -\mathrm{i}\sum_a\left.\frac{\partial(Ax)_a}{\partial\alpha_j}\right|_{\alpha=0}\frac{\partial}{\partial x_a}, \\ P_A\psi(x) &= \psi(x)-\mathrm{i}\sum_{j=1}^{g}\alpha_j I_j^{(0)}\psi(x) \end{aligned} \tag{4.22}$$

李群中无穷多个无穷小元素对标量函数的作用可以用 g 个微量微分算符 $I_j^{(0)}$ 完全描写.

在三维空间, 如果 x 代表系统质心的坐标, 而系统其他内部坐标没有标出, 或者系统本身就是一个质点, x 是质点的坐标, 则由式 (4.13) 得

$$(Ax)_a = \sum_b \left\{\delta_{ab} - \mathrm{i}\sum_d \alpha_d (T_d)_{ab}\right\} x_b = x_a - \sum_{bd} \alpha_d \epsilon_{dab} x_b$$

代入式 (4.22), 算得三维转动群的微量微分算符正是量子力学中的轨道角动量算符

$$I_d^{(0)} = -\mathrm{i}\sum_{ab} \epsilon_{dba} x_b \frac{\partial}{\partial x_a} = L_d \tag{4.23}$$

这里取了自然单位, $\hbar = c = 1$.

设 m 个函数基 $\psi_\mu(x)$ 架设对于 P_G 不变的函数空间, 对应群 G 的表示 $D(G)$

$$P_R\psi_\mu(x) = \sum_\nu \psi_\nu(x) D_{\nu\mu}(R)$$

对无穷小元素, 把表示矩阵 $D(A)$ 按无穷小参数展开, 略去高级无穷小量. 得

$$D(A) = \mathbf{1} - \mathrm{i}\sum_{j=1}^{g} \alpha_j I_j\ , \qquad I_j = \mathrm{i}\ \left.\frac{\partial D(A)}{\partial \alpha_j}\right|_{\alpha=0} \tag{4.24}$$

g 个矩阵 I_j 称为李群表示 $D(G)$ 的生成元, 它是微量微分算符在表示空间的矩阵形式. g 个生成元完全描写了无穷多个无穷小元素在表示 $D(G)$ 中的性质. 如果 $D(G)$ 是李群 G 的真实表示, 则 g 个生成元线性无关. 由于规定参数取实数, 幺正表示的生成元是厄米矩阵. 若变换算符 P_R 是幺正算符, 微量微分算符是厄米算符. 这正是在式 (4.22) 和 (4.24) 中引入 $-\mathrm{i}$ 的目的. 通常把微量微分算符和生成元都统称为微量算符, 或统称为生成元.

设 $RSR^{-1} = T$, T 的参数是 S 和 R 参数的函数

$$t_j = \psi_j(s_1, s_2, \cdots; r_1, r_2, \cdots) \equiv \psi_j(s; r) \tag{4.25}$$

$\psi_j(s;r)$ 也是 $2g$ 个变量的实函数. 对真实表示 $D(G)$, $D(R)D(S)D(R)^{-1} = D(T)$. 等式两边对参数 s_j 求导数, 然后取 $s_j = 0$, 得

$$D(R)\ \frac{\partial D(S)}{\partial s_j} D(R)^{-1}\bigg|_{s=0} = \sum_k \left.\frac{\partial D(T)}{\partial t_k}\right|_{t=0} \left.\frac{\partial \psi_k(s;r)}{\partial s_j}\right|_{s=0}\ ,$$

$$D(R) I_j D(R)^{-1} = \sum_k I_k D_{kj}^{\mathrm{ad}}(R)\ , \qquad D_{kj}^{\mathrm{ad}}(R) = \left.\frac{\partial \psi_k(s;r)}{\partial s_j}\right|_{s=0} \tag{4.26}$$

式 (4.26) 给出群元素 R 和矩阵 $D^{\mathrm{ad}}(R)$ 的一个一一对应或多一对应的关系, 这对应关系对群元素乘积保持不变, 因而 $D^{\mathrm{ad}}(R)$ 是李群的一个表示, 称为伴随 (adjoint) 表示. 伴随表示的维数等于李群的阶数, 它是所有李群都有的一个重要表示.

把式 (4.26) 写成标量函数变换算符 P_R 的形式

$$P_R I_j^{(0)} P_R^{-1} = \sum_k I_k^{(0)} D_{kj}^{\mathrm{ad}}(R) \tag{4.27}$$

微量算符的这一变换关系类似群元素的共轭变换 $RSR^{-1} = T$, 常称为微量算符的共轭变换, 伴随表示描写了微量算符在共轭变换中的变换性质.

四、李群的整体性质

研究李群的整体 (global) 性质, 就是研究李群群空间的拓扑性质. 我们将用物理上习惯的语言来解释李群的整体性质.

首先, 讨论群空间的连通性. 如果群中任意两元素, 它们在群空间的对应点, 可以通过一条完全包含在群空间内的连线连结起来, 则此群空间称为连通的, 这样的连续群称为简单连续 (simply cȏntinuous) 群. SO(3) 群就是简单连续群. 反之, 如果群空间分成不相连结的若干片, 则此连续群称为混合连续 (mixed continuous) 群. 因为实正交矩阵的行列式可取 ± 1, 它们互相不能连续变化, 所以三维实正交矩阵群 O(3) 是混合连续群. 前面说过, 粗略地说, 对简单李群, 群元素都可表为无穷多个无穷小元素的乘积, 而对混合李群, 除了无穷小元素外, 还必须在群空间的每一个连续片给出一个特殊元素 (包括恒元), 它们的乘积才能表出任意元素. 在 O(3) 群的情况, 常取空间反演 σ 作为非固有转动元素的代表, 由恒元, 空间反演和无穷小元素的乘积, 就可表出 O(3) 群的任意元素. 对线性表示来说, 我们将来可以看到, 由生成元就可以计算出简单李群的任意元素 R 的表示矩阵 $D(R)$, 但对混合李群 O(3), 则还需要知道空间反演元素的表示矩阵 $D(\sigma)$.

另一方面, 下面证明混合李群的群空间中, 包含恒元的那个连续片对应元素的集合构成混合李群的不变子李群, 其他连续片对应元素的集合构成这不变子群的陪集. 设 R 和 S 都属于恒元 E 所在的那个连续片, 即它们在群空间中的对应点, 都可以用一条完全包含在群空间内的连续曲线与恒元的对应点相连, 则它们的乘积也可以由恒元在群空间内连续地变过来, 逆元 R^{-1} 也可以由恒元在群内连续地变过来, 即它们都属于此子集. 根据假设恒元已属于此子集, 因此此子集构成子群. 进一步, 设 T 是群中任意元素, 则 TRT^{-1} 可以由恒元 $TET^{-1} = E$ 在群内连续地变过来, 它在群空间中的对应点可以用一条完全包含在群空间内的连续曲线与恒元的对应点相连, 因而此子群是不变子群. 在群空间其他连续片各取一个代表元素, 属每一个连续片的元素都可由相应代表元素出发在群空间内连续变化得到, 因而属于同一个陪集. 证完. 混合李群的性质完全由此简单李群 (不变子群), 和每一连续片 (陪集) 中一个代表元素的性质决定. 今后我们将重点讨论简单李群的性质.

其次, 讨论简单李群群空间的连通度. 在简单李群的群空间中, 元素 R 的点可与恒元的对应点通过许多连线相连结. 有些连线可以在群空间内互相连续变化, 有

些则不能. 这样, 这些连线就分成若干组, 属同一组的连线可以互相在群空间内连续变化, 而不同组的连线则不能. 这些连线的组数称为群空间的连通度. 李群的性质会与群空间的连通度有密切关系.

我们先来举一个简单的例子. 实数的集合, 用数的加法定义元素的"乘积", 这集合构成群, 简称为加法群. 此群元素本身就是实数 (参数), 它在实数轴上连续变化, 实数轴就是群空间, 原点对应恒元 (数零). 在群空间中代表元素的点与代表恒元的点间所有连线都可在群空间内连续变化, 因而加法群的群空间是单连通的. 它是一阶阿贝尔简单李群, 只有一维不可约表示. 加法群有无穷多个一维不等价不可约表示, 用复数 τ 标记

$$D^{\tau}(\alpha) = \exp\left(-\mathrm{i}\tau\alpha\right) \ , \qquad \tau \ \text{是复数}, \qquad \alpha \ \text{是实数} \tag{4.28}$$

式 (4.28) 指数上引入 $-\mathrm{i}$ 只是为了以后方便.

再看绕 x_3 轴转动任意角 ω 的变换 $R(\vec{e}_3,\omega)$ 集合, 两变换乘积对应参数 ω 相加, 转动 2π 角的变换等于恒等变换

$$R(\vec{e}_3,\omega_1)R(\vec{e}_3,\omega_2) = R(\vec{e}_3,\omega_1+\omega_2) \ , \qquad R(\vec{e}_3,\omega+2\pi) = R(\vec{e}_3,\omega) \tag{4.29}$$

此集合构成李群, 称为二维幺模实正交矩阵群, 记作 SO(2) 群. 它是一阶阿贝尔李群, 群参数 ω 在实数轴上 $\pm\pi$ 之间变化, $\pm\pi$ 对应同一个元素. 群空间边界上的这一性质, 决定了 SO(2) 群群空间的连通度, 对群的性质产生很大的影响. 很明显, 群空间中对应群元素 $R(\vec{e}_3,\omega)$ 的点和对应恒元的点 (原点) 可以直接相连, 也可以通过包含边界上 $\pm\pi$ 间若干次跳跃的连线相连. 设从 π 到 $-\pi$ 的跳跃称为正跳跃, 从 $-\pi$ 到 π 的跳跃称为负跳跃. 对包含两次不同类跳跃的连线, 这两次跳跃可以在群空间内通过连续变化而消去. 连线所包含的正跳跃次数减去负跳跃次数称为该连线的跳跃次数. 当连线在群空间内连续变化时, 它的跳跃次数不会改变. 这样, 由原点到 ω 的连线分成无穷多组, 每组用跳跃次数来标记, 不同组的连线不能在群空间内互相连续变化, SO(2) 群的群空间是无穷多度连通的.

把 SO(2) 群的元素和加法群的元素建立如下 $1:\infty$ 的对应关系

$$R(\vec{e}_3,\omega) \longleftarrow \omega + 2n\pi \ , \qquad n \ \text{是任意整数} \tag{4.30}$$

这种对应关系对元素乘积保持不变, 因而 SO(2) 群和加法群同态. SO(2) 群的不等价不可约表示也可表为式 (4.28) 的形式, 但因式 (4.29), τ 只能取整数 m

$$D^{m}(\vec{e}_3,\omega) = \exp\left(-\mathrm{i}m\omega\right), \qquad m \ \text{是整数} \tag{4.31}$$

当 m 不是整数时, 表示矩阵和群元素之间变成多一对应的关系, 按照线性表示的定义, 这已不是 SO(2) 群的表示, 有时称为多值表示.

数学中已经证明, 当简单李群 G 的群空间是 n 度连通时, 它一定同态于另一个群空间是单连通的简单李群, 同态对应关系是 $1:n$. 这单连通的简单李群称为李群 G 的覆盖群. 覆盖群的真实表示就是群 G 的 n 值表示. 加法群是 SO(2) 群的覆盖群.

现在回到三维转动群来. 三维转动群的群空间是半径为 π 的球体, 在球面上直径两端的点代表同一个元素, 从而群空间内的连线就可以包含直径两端的跳跃. 跳跃前后的两点始终保持在同一直径的两端, 位置上是相关联的. 它们不能独立地变化位置, 只能成对地在球面上移动, 因而此跳跃无法通过连续移动而消去. 如果连线包含两次跳跃, 则可把跳跃点反向移到一起, 包含在两次跳跃间的连线, 是沿一个封闭的环形路径转一圈. 连续的环形路径是可以在群空间内连续地收缩到一点而消去的, 而在直径两端的来回跳跃等于不跳, 因此两次跳跃可以通过在群空间内的连续变化而消去. 对 SO(3) 群, 从原点到群空间任一点的连线可以分成两组, 一组包含直径两端的偶数次跳跃, 另一组包含奇数次跳跃, 属同一组的连线可以在群空间内做连续变化而重合, 但分属两组的连线则不能. 就是说, SO(3) 群的群空间是双连通的. 我们将证明, SO(3) 群的覆盖群是二维幺模幺正矩阵的集合构成的群 SU(2). SU(2) 群的真实表示是 SO(3) 群的双值表示, 它是自旋能够存在的数学基础.

最后, 讨论群空间的紧致性. 在欧氏空间, 包含边界的闭区域是紧致的, 不包含边界的开区域 (包括无穷区域) 是非紧致的. 群空间是紧致的李群称为紧致李群. 三维转动群是紧致李群. 物理中常见的非紧致李群, 有洛伦兹群和平移群. 对洛伦兹群可选惯性系间的相对速度作为一个参数, 按狭义相对论, 相对速度只能趋近光速, 不能等于光速, 因而洛伦兹群的群空间是开区域, 洛伦兹群是非紧致李群. 在第三章我们已多次提到, 要把有限群表示理论的主要结论推广到连续群来, 关键是要解决群函数对群元素的无限求和问题. 连续群的群元素是用一组连续实参数来描写的, 一个自然的想法就是把对群元素的求和改成对群参数的积分. 可以证明, 对紧致李群, 可以适当定义对群参数的积分, 使积分存在, 且满足对左乘或右乘群元素保持不变的性质, 从而可以把有限群表示理论的主要结论推广到紧致李群中来. 但对非紧致李群这样的积分不存在, 有限群的有些结论不能推广. 下节我们将讨论三维转动群的覆盖群和群上的积分.

4.3 三维转动群的覆盖群

本节将证明三维转动群的覆盖群是二维幺模幺正矩阵群, 并讨论它们群上的积分.

一、二维幺模幺正矩阵群

二维幺模幺正矩阵的集合, 按照普通的矩阵乘积, 明显满足群的四个条件, 因而

构成群, 记作 SU(2) 群. 对于群中任意元素 u, 它的矩阵元素满足

$$u = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in \mathrm{SU}(2),$$
$$aa^* + cc^* = bb^* + dd^* = ad - bc = 1 \ , \qquad ab^* + cd^* = 0$$

容易解得 $a = d^*$, $b = -c^*$ 和 $|c|^2 + |d|^2 = 1$. 取 $d = h_0 + \mathrm{i}h_3$ 和 $c = h_2 - \mathrm{i}h_1$, 四个实参数 h_i 中只有三个是独立的

$$u = \begin{pmatrix} h_0 - \mathrm{i}h_3 & -h_2 - \mathrm{i}h_1 \\ h_2 - \mathrm{i}h_1 & h_0 + \mathrm{i}h_3 \end{pmatrix}, \qquad \sum_{i=0}^{3} h_i^2 = 1 \tag{4.32}$$

为了下面讨论的方便, 我们用实矢量 $\vec{\omega}$ 的球坐标 ω, θ 和 φ 来代替上面的参数 h_i, 其中 $\vec{\omega}$ 的长度是 ω, 方向沿 $\hat{\boldsymbol{n}}(\theta, \varphi)$, θ 和 φ 是方向 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 的极角和方位角

$$\begin{aligned} h_0 &= \cos(\omega/2) \ , & h_1 &= \sin(\omega/2)\sin\theta\cos\varphi \ , \\ h_3 &= \sin(\omega/2)\cos\theta \ , & h_2 &= \sin(\omega/2)\sin\theta\sin\varphi \ , \end{aligned}$$

$$u(\hat{\boldsymbol{n}}, \omega) = \mathbf{1}\cos(\omega/2) - \mathrm{i}\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})\sin(\omega/2) \tag{4.33}$$

其中, σ_a 是三个泡利矩阵, 它们是无迹厄米兼幺正矩阵, 已在式 (4.9) 做了介绍. 这里引进的矢量 $\vec{\sigma} = \sum_a \vec{e}_a\sigma_a$, 它的分量是矩阵. 只要不颠倒乘积次序, 它满足所有矢量代数的公式, 如矢量的点乘和叉乘, 还有

$$\begin{aligned} \vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}} &= \sum_{a=1}^{3} \sigma_a n_a = \begin{pmatrix} n_3 & n_1 - \mathrm{i}n_2 \\ n_1 + \mathrm{i}n_2 & -n_3 \end{pmatrix}, \\ \left(\vec{\sigma}\times\vec{U}\right)\cdot\vec{V} &= \vec{\sigma}\cdot\left(\vec{U}\times\vec{V}\right) = \sum_{abc} \epsilon_{abc}\sigma_a U_b V_c \ , \\ (\vec{\sigma}\cdot\vec{a})\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{b}\right) &= \mathbf{1}\left(\vec{a}\cdot\vec{b}\right) + \mathrm{i}\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{a}\times\vec{b}\right) \end{aligned} \tag{4.34}$$

最后一个公式可用两边取迹, 或乘 σ_a 后再取迹的办法证明, 证明中用到式 (4.9). 由式 (4.33) 和 (4.34) 又可证明

$$\begin{aligned} & u(\hat{\boldsymbol{n}}, \omega_1)u(\hat{\boldsymbol{n}}, \omega_2) = u(\hat{\boldsymbol{n}}, \omega_1 + \omega_2), \\ & u(\hat{\boldsymbol{n}}, 4\pi) = \mathbf{1} \ , \qquad u(\hat{\boldsymbol{n}}, 2\pi) = -\mathbf{1}, \\ & u(\hat{\boldsymbol{n}}, \omega) = u(-\hat{\boldsymbol{n}}, 4\pi - \omega) = -u(-\hat{\boldsymbol{n}}, 2\pi - \omega) \end{aligned} \tag{4.35}$$

可见 $\vec{\omega}$ 的变化范围是半径为 2π 的球体, 在球体内的点和 SU(2) 群的元素 u 间有一一对应的关系, 在外球面上的点都对应同一个元素 $-\mathbf{1}$. 这就是取参数 $\vec{\omega}$ 时 SU(2) 群的群空间. 首先, SU(2) 群的群空间是连通的, 群中任一元素 u 都可以由恒元出发在群空间内连续变化得到, 因而 SU(2) 群是简单李群. 其次, 这群空间与 SO(3) 群

的群空间性质很不相同. 由于外球面上的点代表同一个元素, 群空间的连线在到达外球面时可在此球面上任意跳跃, 而不是只限于在直径两端的跳跃. 跳跃前后两点都可独立地在球面上自由移动, 从而可把此两点连续地移到一起, 消去此跳跃, 因而 SU(2) 群的群空间是单连通的. 也可用另一方法来理解. 正因为外球面上的点是同一个元素, 球面上的跳跃也可以看成是球面上的一根连续曲线, 因而通过曲线在群空间内的连续变化可以消去跳跃. 第三, SU(2) 群的群空间是欧氏空间的一个闭区域, 因而 SU(2) 群是一个紧致李群. 最后, 利用式 (4.34) 不难证明 (见习题第 6 题), 相同 ω 的元素互相共轭, 构成一类.

二、同态关系

泡利矩阵的实线性组合仍是无迹厄米矩阵. 反之, 任何二维无迹厄米矩阵 X 只包含三个独立实参数, 都可展开为泡利矩阵的实线性组合. 现取组合系数为三维空间任意点 P 的三个直角坐标

$$\begin{aligned} &X=\sum_{a=1}^{3}\ \sigma_a x_a=\vec{\sigma}\cdot\vec{r}=\begin{pmatrix} x_3 & x_1-\mathrm{i}x_2 \\ x_1+\mathrm{i}x_2 & -x_3\end{pmatrix}, \\ &x_a=\frac{1}{2}\ \mathrm{Tr}\left(X\sigma_a\right)\ , \qquad \det X=-\sum_{a=1}^{3}\ x_a^2 \end{aligned} \tag{4.36}$$

因此无迹厄米矩阵 X 和 P 点的位置矢量 $\vec{r}$ 间有一一对应关系.

设 u ∈SU(2) 是任意一个二维幺模幺正矩阵, X 经过 u^{-1} 的相似变换仍是一个无迹厄米矩阵, 且有相同的行列式

$$X'=uXu^{-1}, \qquad \det\ X'=\det\ X \tag{4.37}$$

X' 对应空间另一点 P' 的坐标矢量 $\vec{r'}$, 而且 $\vec{r'}$ 的分量可以表为 $\vec{r}$ 分量的线性齐次函数

$$x_a'=\sum_b\ R_{ab}x_b \tag{4.38}$$

由于 X' 和 X 的行列式相同, R 矩阵是实正交矩阵, R ∈O(3). 显然当 u 取恒元 **1** 时, R 也是恒元. 既然 u 可以由恒元在 SU(2) 群的群空间内连续变化得到, 对应的 R 也可以由恒元在 O(3) 群的群空间内连续变化得到, 因而 R ∈SO(3). 反之, 对于 SO(3) 群任一元素 R ∈SO(3), 它把坐标矢量 $\vec{r}$ 变成 $\vec{r'}$, 并把 X 变成 X'. 既然 X 和 X' 都是无迹厄米矩阵, 且有相同的行列式, 它们必可以通过幺模幺正相似变换 u ∈SU(2) 联系起来 [见式 (4.37)], 但这样的 u 矩阵不是唯一的. 设

$$u_1Xu_1^{-1}=u_2Xu_2^{-1}=X'$$

得 $u_2^{-1}u_1$ 可与任何 X 矩阵对易, 故它必是常数矩阵, $u_1 = \lambda u_2$. 由于幺模条件, $\lambda = \pm 1$. 把 X 和 X' 的表达式代入式 (4.37), 由于 $\vec{r}$ 的任意性, 得

$$u\sigma_b u^{-1} = \sum_{a=1}^{3} \sigma_a R_{ab} \tag{4.39}$$

它给出 SO(3) 群一个元素 R 和 SU(2) 群一对元素 $\pm u$ 间的一二对应关系. 容易证明这对应关系对群元素乘积保持不变

$$u_1\sigma_a u_1^{-1} = \sum_b \sigma_b \left(R_1\right)_{ba}, \qquad u_2\sigma_b u_2^{-1} = \sum_d \sigma_d \left(R_2\right)_{db},$$

$$u_2u_1\sigma_a u_1^{-1}u_2^{-1} = \sum_b u_2\sigma_b u_2^{-1}\left(R_1\right)_{ba} = \sum_d \sigma_d \sum_b \left\{\left(R_2\right)_{db}\left(R_1\right)_{ba}\right\}$$

因此, SO(3) 群和 SU(2) 群同态

$$\mathrm{SO}(3) \sim \mathrm{SU}(2) \tag{4.40}$$

如果把式 (4.33) 的 $u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$ 矩阵代入式 (4.39), 通过直接计算, 算得的 R 矩阵正是绕 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向转动 ω 角的元素 $R(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$,

$$u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)\sigma_b u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)^{-1} = \sum_{a=1}^{3} \sigma_a R(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)_{ab} \tag{4.41}$$

附录 7 给出这关系的一种几何证明方法.

现在, SO(3) 群和 SU(2) 群都用参数 $\vec{\omega}$ 描写, SO(3) 群的群空间半径为 π, SU(2) 群的群空间半径为 2π. 事实上, 在半径为 π 的球体内, SO(3) 群和 SU(2) 群的元素一一对应. 对 SU(2) 群来说, 还有半径从 π 到 2π 的环所对应的元素, 它们通过式 (4.35), 等于半径为 π 的球体中相应元素的负值, 这一对 $\pm u$ 矩阵对应 SO(3) 群同一个元素. SO(3) 群的群空间是双连通的, SU(2) 群的群空间是单连通的, SU(2) 群正是 SO(3) 群的覆盖群. SO(3) 群的真实表示, 称为单值表示, 是 SU(2) 群的非真实表示. SU(2) 群的真实表示, 严格说不是 SO(3) 群的表示, 称为 SO(3) 群的双值表示, 它们在物理上与自旋的存在密切相关. 我们只要找出 SU(2) 群的全部不等价不可约表示, 也就找出了 SO(3) 群的全部不等价不可约单值表示和双值表示.

既然 SO(3) 群和 SU(2) 群的元素已经通过式 (4.41) 建立起一二对应的同态关系, 今后为了书写方便, 常把 SU(2) 群的元素 $u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$, 也称为绕 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向转动 ω 角的变换. 以后我们会知道, SU(2) 群与旋量有密切关系, 文献中常说的"旋量转动 4π 角才恢复原状", 就是对 SU(2) 群的所谓转动来说的.

三、群上的积分

为了把有限群表示理论的主要结论推广到李群中来, 关键的问题是要解决好群函数对群元素的无限求和问题. 李群的群函数实际上是李群参数的函数, 定义域是

李群的群空间. 在群空间测度不为零的区域内, 要求群函数是群参数的单值、连续、可微和可积函数. 有限群中群函数对群元素取平均值, 推广到李群, 变成了群函数对群元素的积分, 也就是对群参数的带权积分

$$\frac{1}{g}\sum_{R\in G} F(R) \longrightarrow \int \mathrm{d}RF(R) = \int (\mathrm{d}r)\ W(R)F(R) \tag{4.42}$$

一般说来, 应该引入权函数 $W(R)$, 因为即使开始不引入, 做参数的积分变换后, 雅可比行列式就变成新的权函数. 可以把权函数 $W(R)$ 理解为在群空间中元素 R 的点的邻域, $\mathrm{d}r$ 体积内, 元素的相对密度. 作为密度函数, 要求 $W(R)$ 单值、可积、不小于零和不发散, 在群空间任何一个测度不为零的区域内不恒为零, 通常要求权函数在整个群空间积分是归一化的

$$\begin{aligned} &\int \mathrm{d}R\ F(R) = \int \mathrm{d}r\ W(R)F(R) > 0\ , \qquad \text{若 } F(R) \geqslant 0\ , \text{但不恒等于 } 0 \\ &\qquad \frac{1}{g}\sum_{R\in G} 1 = 1 \longrightarrow \int \mathrm{d}R = \int (\mathrm{d}r)\ W(R) = 1 \end{aligned} \tag{4.43}$$

群函数在群空间中对群参数的这种积分称为群上的积分. 群上的积分运算显然是线性运算

$$\int \mathrm{d}R\ \left[aF_1(R) + bF_2(R)\right] = a\int \mathrm{d}R\ F_1(R) + b\int \mathrm{d}R\ F_2(R) \tag{4.44}$$

希望选择权函数 $W(R)$, 使群上的积分对左乘和右乘群元素都保持不变

$$\int \mathrm{d}R\ F(R) = \int \mathrm{d}R\ F(SR) = \int \mathrm{d}R\ F(RS) \tag{4.45}$$

设 $T = SR$, 上面条件就变成

$$\begin{aligned} \int (\mathrm{d}t)W(T)F(T) &= \int \mathrm{d}T\ F(T) = \int \mathrm{d}R\ F(R) \\ &= \int \mathrm{d}R\ F(SR) = \int \mathrm{d}R\ F(T) = \int (\mathrm{d}r)W(R)F(T) \end{aligned}$$

就是说, $(\mathrm{d}r)W(R)$ 不依赖于群元素 R. 以恒元邻近的权函数作为标准, 取为常数 W_0, 小体积元为 $(\mathrm{d}\alpha)$,

$$(\mathrm{d}r)\ W(R) = (\mathrm{d}t)\ W(T) = (\mathrm{d}\alpha)\ W_0 \tag{4.46}$$

把式 (4.46) 看作积分变量替换, 权函数就是变换的雅可比行列式. 权函数有限, 就是要求群中各元素的邻域内, 元素的相对密度有限. 设 R 固定, 把 R 邻近的元素记作 R', 参数为 r'_j, 恒元邻近元素记作 A, 参数 α_j, $R' = AR$ 或 $A = R'R^{-1}$, 分别写出雅可比行列式

$$W_0 = W(R) \left| \det \left\{ \frac{\partial f_j(\alpha; r)}{\partial \alpha_k} \right\} \right|_{\alpha=0} \tag{4.47}$$

$$W(R) = W_0 \left| \det \left\{ \frac{\partial f_j(r'; \bar{r})}{\partial r'_k} \right\} \right|_{r'=r} \tag{4.48}$$

通过这两式中的任一个, 可把 $W(R)$ 用 W_0 表出, 再用归一化条件式 (4.43) 定出 W_0. 下一小节将根据式 (4.47), 以 $\vec{\omega}$ 为参数计算 SU(2) 群群上积分的积分元, 结果为

$$\int \mathrm{d}u F(u) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \sin^2(\omega/2) F(\vec{\omega}) \mathrm{d}\omega \tag{4.49}$$

SO(3) 群的参数 ω 变化范围缩小一半, 因而

$$\int \mathrm{d}R F(R) = \frac{1}{2\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta \int_0^{\pi} \sin^2(\omega/2) F(\vec{\omega}) \mathrm{d}\omega \tag{4.50}$$

对类函数积分时, 可把 θ 和 φ 先积分掉, 即取 $\int \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi = 4\pi$.

现在, 对紧致李群, 例如 SU(2) 群和 SO(3) 群, 有限群中群函数对群元素求和的公式推广为群上的积分式 (4.42), 有限群表示理论中的许多结论就可以推广到紧致李群中来. 这些结论主要归纳如下:

(1) 线性表示等价于幺正表示, 两等价的幺正表示可通过幺正的相似变换相联系.

(2) 实表示等价于实正交表示, 两等价的实正交表示可通过实正交的相似变换相联系.

(3) 可约表示一定是完全可约的. 不可约表示的充要条件是找不到非常数矩阵与所有表示矩阵对易.

(4) 不等价不可约幺正表示的矩阵元和特征标满足正交关系

$$\begin{aligned} &\int \mathrm{d}R \; D^i_{\mu\rho}(R)^* D^j_{\nu\lambda}(R) = \frac{1}{m_j} \delta_{ij} \delta_{\mu\nu} \delta_{\rho\lambda}, \\ &\int \mathrm{d}R \; \chi^i(R)^* \chi^j(R) = \delta_{ij} \end{aligned} \tag{4.51}$$

任何表示都可按不可约表示展开

$$\begin{aligned} &X^{-1} D(R) X = \bigoplus_j a_j D^j(R), \\ &\chi(R) = \sum_j a_j \chi^j(R), \\ &a_j = \int \mathrm{d}R \; \chi^j(R)^* \chi(R) \end{aligned} \tag{4.52}$$

对特征标的积分可以化为类上的积分, 例如对 SU(2) 群

$$a_j = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\omega \ \sin^2(\omega/2)\chi^j(\omega)^*\chi(\omega) \tag{4.53}$$

(5) 表示等价的充要条件是每个元素在两表示中的特征标对应相等, 不可约表示的充要条件是特征标满足

$$\int \mathrm{d}R \ |\chi(R)|^2 = 1 \tag{4.54}$$

对 SU(2) 群, 不等价不可约表示特征标的正交关系表为

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\omega \ \sin^2(\omega/2) \ \chi^i(\omega)^*\chi^j(\omega) = \delta_{ij} \tag{4.55}$$

当 $i=j$ 时, 此式就是不可约表示的充要条件 (4.54).

(6) 设 P_G 是与群 G 同构的标量函数变换算符群, 则把任意函数投影到属不可约表示 D^j μ 行函数的投影算符 P_μ^j 是

$$\begin{aligned}
&P_\mu^j = m_j \int \mathrm{d}R \ D_{\mu\mu}^j(R)^* P_R \\
&P^j = \sum_\mu P_\mu^j = m_j \int \mathrm{d}R \ \chi^j(R)^* P_R \\
&P_\mu^j P_\nu^i = \delta_{ij}\delta_{\mu\nu}P_\mu^j \ , \qquad P^jP^i = \delta_{ij}P^j \\
&\sum_j P^j = \sum_{j\mu} P_\mu^j = \mathbf{1} \quad (\text{恒等变换})
\end{aligned} \tag{4.56}$$

(7) 自共轭的不可约幺正表示与其复共轭表示的幺正相似变换矩阵只能是对称或反对称的. 这相似变换矩阵对实表示是对称的, 对自共轭而非实表示是反对称的.

* 四、SU(2)群群上的积分

SU(2) 群是紧致李群, 我们来具体计算它的群上积分的权函数 $W(R)$,

$$\mathrm{d}u = W(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)\mathrm{d}\omega_1\mathrm{d}\omega_2\mathrm{d}\omega_3 = W(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)\omega^2\sin\theta\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi \tag{4.57}$$

计算前先做些简化. 由于空间不同方向是平等的, 权函数 $W(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$ 应该与转轴方向 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 无关. 可以用不同方法来论证这一结论. 相同 ω 的元素 $u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$ 是互相共轭的, 它们及其邻近元素可通过同一个幺正相似变换联系起来, 因此群空间中, 互相共轭的两元素所在点的邻域中, 元素的相对密度应该相等. 另一方法是, 互相共轭的两元素, 参数 $\vec{\omega}$ 间只相差一个转动变换, 按式 (4.46) 做参数积分变换, 它们的雅可比行列式就是转动变换矩阵的行列式, 等于 1.

现在权函数 W 只是 ω 的函数, 在式 (4.47) 中, 以 $u(\vec{e}_3,\omega)$ 代 R, 以 $u(A)$ 代 A. 因为求导后要取 $\alpha_j=0$, 乘积只需取到 α_j 的一级小量.

$$
\begin{aligned}
&u(\vec{e}_3,\omega)=\mathbf{1}\cos(\omega/2)-\mathrm{i}\sigma_3\sin(\omega/2)\ ,\\
&u(A)=\mathbf{1}-\mathrm{i}\left(\sigma_1\alpha_1+\sigma_2\alpha_2+\sigma_3\alpha_3\right)/2\ ,\\
&u(A)u(\vec{e}_3,\omega)=\mathbf{1}\cos\left(\omega'/2\right)-\mathrm{i}\left(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}'\right)\sin\left(\omega'/2\right)\\
&\quad=\mathbf{1}\left\{\cos(\omega/2)-\alpha_3\sin(\omega/2)/2\right\}-\mathrm{i}\sigma_1\left\{\alpha_1\cos(\omega/2)+\alpha_2\sin(\omega/2)\right\}/2\\
&\qquad-\mathrm{i}\sigma_2\left\{\alpha_2\cos(\omega/2)-\alpha_1\sin(\omega/2)\right\}/2-\mathrm{i}\sigma_3\left\{\alpha_3\cos(\omega/2)+2\sin(\omega/2)\right\}/2
\end{aligned}
$$

乘积元素的参数为

$$
\begin{aligned}
&\cos(\omega'/2)=\cos(\omega/2)-\alpha_3\sin(\omega/2)/2=\cos\{(\omega+\alpha_3)/2\}\ ,\\
&\sin(\omega'/2)=\sin\{(\omega+\alpha_3)/2\}=\sin(\omega/2)+\alpha_3\cos(\omega/2)/2\ ,\\
&\omega'n_1'=\omega\{\sin(\omega/2)\}^{-1}\left\{\alpha_1\cos(\omega/2)+\alpha_2\sin(\omega/2)\right\}/2\ ,\\
&\omega'n_2'=\omega\{\sin(\omega/2)\}^{-1}\left\{\alpha_2\cos(\omega/2)-\alpha_1\sin(\omega/2)\right\}/2\ ,\\
&\omega'n_3'=\omega'\{\sin(\omega'/2)\}^{-1}\left\{\alpha_3\cos(\omega/2)+2\sin(\omega/2)\right\}/2=\omega'=\omega+\alpha_3
\end{aligned}
$$

计算中要注意, 当后面的括号内没有零级量时, 前面的 ω' 可用 ω 代替, 但当后面括号内有零级量时, 前面的 ω' 也必须取到一级量. 代入式 (4.47) 得

$$
\begin{aligned}
\frac{W_0}{W(\omega)}=&\left|\det\left\{\frac{\partial(\omega'n_a')}{\partial\alpha_b}\right\}\right|_{\alpha=0}=\begin{vmatrix}(\omega/2)\cot(\omega/2) & \omega/2 & 0\\ -\omega/2 & (\omega/2)\cot(\omega/2) & 0\\ 0 & 0 & 1\end{vmatrix}\\
=&\,\omega^2\left\{4\sin^2(\omega/2)\right\}^{-1}\ ,
\end{aligned}
$$

$$
W(\omega)=W_0 4\omega^{-2}\sin^2(\omega/2)
$$

归一化条件为

$$
1=4W_0\int_0^{2\pi}\sin^2(\omega/2)\mathrm{d}\omega\int_0^{\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\varphi=16\pi^2W_0
$$

最后得到

$$
W(\omega)=\frac{\sin^2(\omega/2)}{4\pi^2\omega^2} \tag{4.58}
$$

采用参数 ω, θ 和 φ 时, 群上的积分为式 (4.49).

4.4 SU(2) 群的不等价不可约表示

本节研究 SU(2) 群、SO(3) 群和 O(3) 群的不等价不可约表示及其基本性质.

一、欧拉角

用参数 $\vec{\omega}$ 描写 SO(3) 群的任意元素 $R(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$, 几何意义清楚, 它代表绕 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向转动 ω 角的变换. 更重要的是, 在群空间恒元邻近的区域内, 参数与群元素有一一对应的关系, 因而这组参数适于做理论研究. 但这组参数在实际计算中不太方便, 表现在根据 R 矩阵形式定这组参数比较麻烦. 知道了固定在系统上的动坐标系 K' 关于定坐标系 K 的相对位置, 要确定相对转动的参数也相当困难. 在计算 SO(3) 群不等价不可约表示时, 最好能把群中任意元素表成三个绕坐标轴向转动的乘积, 这样只需要计算绕坐标轴向转动元素的表示矩阵, 就不必计算任意元素的表示矩阵. 欧拉 (Euler) 角正好具有这些优点, 但欧拉角在恒元邻近一个测度为零的区域, 参数和群元素多一对应, 不便于理论研究. 两组参数各有优缺点, 可根据情况选取.

对任意给定的幺模实正交矩阵 R, 可把 R 的第三列矩阵元素看作一个单位矢量 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 的分量, 则 R 作用在 $\vec{e}_3$ 上把它变到 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向

$$(R\vec{e}_3)_a = R_{a3} \equiv n_a$$

这里的 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向与 R 的转动轴方向是两回事, 不要混淆. 设 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向的极角为 β, 方位角为 α, 它们很容易由 R 矩阵的第三列矩阵元素定出.

在式 (4.14) 我们引入了一个有用的转动元素 $S(\varphi,\theta)$, 它与 R 有类似的性质, 也把 $\vec{e}_3$ 转到空间给定的方向. 取此方向为上述 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向, 即取 $\theta=\beta$ 和 $\varphi=\alpha$, 则 $S^{-1}R$ 保持 x_3 轴不变, 是绕 x_3 轴的转动

$$S(\alpha,\beta)^{-1}R = R(\vec{e}_3,\gamma), \qquad R = S(\alpha,\beta)R(\vec{e}_3,\gamma) = R(\vec{e}_3,\alpha)R(\vec{e}_2,\beta)R(\vec{e}_3,\gamma) \tag{4.59}$$

R 矩阵表达成绕坐标轴向的三次转动. 把式 (4.14) 代入, 得

$$R(\alpha,\beta,\gamma) = \begin{pmatrix} c_\alpha c_\beta c_\gamma - s_\alpha s_\gamma & -c_\alpha c_\beta s_\gamma - s_\alpha c_\gamma & c_\alpha s_\beta \\ s_\alpha c_\beta c_\gamma + c_\alpha s_\gamma & -s_\alpha c_\beta s_\gamma + c_\alpha c_\gamma & s_\alpha s_\beta \\ -s_\beta c_\gamma & s_\beta s_\gamma & c_\beta \end{pmatrix} \tag{4.60}$$

其中, $c_\alpha=\cos\alpha$, $s_\alpha=\sin\alpha$, 以此类推. 元素 R 的这组参数 $(\alpha,\ \beta,\ \gamma)$ 称为欧拉角, 它们的变化范围是

$$-\pi \leqslant \alpha \leqslant \pi\ , \qquad 0 \leqslant \beta \leqslant \pi\ , \qquad -\pi \leqslant \gamma \leqslant \pi \tag{4.61}$$

我们已解释过, α 和 β 角可根据 R 矩阵的第三列元素定出, 而由式 (4.59) 定 γ 角不太方便. 但由式 (4.60), 把第三行元素看作单位矢量, 它的极角是 β, 方位角是 $\pi-\gamma$. 这提供了由 R 矩阵的矩阵元素计算全部三个欧拉角的简单方法, 同时也给出了三个欧拉角的明显几何意义. 设 R 把坐标系由 K 位置转到 K' 位置, 则由

$$R(\alpha,\beta,\gamma)\vec{e}_3 = \hat{\boldsymbol{n}}(\beta,\alpha)\ , \qquad R(\alpha,\beta,\gamma)^{-1}\vec{e}_3 = \hat{\boldsymbol{n}}(\beta,\pi-\gamma) \tag{4.62}$$

知, K' 系的第三轴在 K 系的极角是 β, 方位角是 α, 而 K 系的第三轴在 K' 系的极角是 β, 方位角是 $\pi-\gamma$. 根据 R 矩阵的第三列和第三行矩阵元素计算欧拉角和根据 K' 系和 K 系的相对位置来计算欧拉角, 是计算转动变换 R 的欧拉角的两种常用方法.

注意, 在 $\beta=0$ 时, $R(\alpha,0,\gamma)$ 是绕 $\vec{e}_3$ 轴转动 $\alpha+\gamma$ 角的变换, α 角和 γ 角中只有一个是独立的. 在恒元邻近发生欧拉角参数和群元素的多一对应关系, 是欧拉角参数的缺点. 在 $\beta=\pi$ 邻近也有类似的多一对应关系.

式 (4.59) 把三维空间任意转动 R 分解为绕定坐标系 K 的坐标轴向的三次转动的乘积. 如果把转动轴移到动坐标系 K' 的坐标轴方向, 则乘积次序会变化. 把式 (4.59) 改写为

$$\begin{aligned} R(\alpha,\beta,\gamma) &= R(\vec{e}_3,\alpha)R(\vec{e}_2,\beta)R(\vec{e}_3,\gamma) \\ &= \left\{[R(\vec{e}_3,\alpha)R(\vec{e}_2,\beta)]\, R(\vec{e}_3,\gamma)\, [R(\vec{e}_3,\alpha)R(\vec{e}_2,\beta)]^{-1}\right\} \\ &\quad\times\ \left\{R(\vec{e}_3,\alpha)R(\vec{e}_2,\beta)R(\vec{e}_3,\alpha)^{-1}\right\} R(\vec{e}_3,\alpha) \end{aligned} \tag{4.63}$$

R 变成先绕 x_3 轴转动 α 角, 再绕新的 x_2' 轴转动 β 角, 最后再绕更新的 x_3'' 轴转动 γ 角. 这公式在有的文献上也有出现, 希望读者能理解这些公式.

作单位球面, K' 系的第一和第三两轴分别与球面相交于 Q 和 P 两点. P 点位置决定了欧拉角 α 和 β, P 点固定后, Q 点在大圆弧上移动, 描写了 K' 系中 $x_1'x_2'$ 平面绕 x_3' 轴的转动, 也就是决定了 γ 角. R 邻近元素得到的 K' 系的 x_3' 轴与单位球面的交点, 在 P 点邻近面积元 $\sin\beta\mathrm{d}\beta\mathrm{d}\alpha$ 中变, 而 x_1' 轴与单位球面的交点, 在 Q 点邻近大圆弧 $\mathrm{d}\gamma$ 中变. 当左乘或右乘群元素时, P 点和 Q 点在球面上移动, R 邻近元素的对应点也跟着 P 和 Q 点移动, 上述面积元的面积和大圆弧的弧长是不变的, 因而群元素的相对密度也是不变的. 采用欧拉角作为参数时, 群上积分的积分元与面积元的面积和大圆弧的弧长成比例

$$\int F(R)\mathrm{d}R = \frac{1}{8\pi^2}\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\alpha\int_0^{\pi}\sin\beta\mathrm{d}\beta\int_{-\pi}^{\pi}F(\alpha,\beta,\gamma)\mathrm{d}\gamma \tag{4.64}$$

前面系数是由归一化条件定出来的

$$\int \mathrm{d}R = \frac{1}{8\pi^2}\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\alpha\int_0^{\pi}\sin\beta\mathrm{d}\beta\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\gamma = 1 \tag{4.65}$$

SU(2) 群也可以类似地定义欧拉角, 群上积分的积分元也类似, 只是 γ 角的变化范围扩大了一倍

$$u(\alpha,\beta,\gamma) = u(\vec{e}_3,\alpha)u(\vec{e}_2,\beta)u(\vec{e}_3,\gamma) \tag{4.66}$$

$$
\begin{aligned}
&\int F(u)\mathrm{d}u = \frac{1}{16\pi^2}\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\alpha\int_0^{\pi}\sin\beta\mathrm{d}\beta\int_{-2\pi}^{2\pi}F(\alpha,\beta,\gamma)\mathrm{d}\gamma\ ,\\
&\int \mathrm{d}u = \frac{1}{16\pi^2}\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\alpha\int_0^{\pi}\sin\beta\mathrm{d}\beta\int_{-2\pi}^{2\pi}\mathrm{d}\gamma = 1
\end{aligned}
\tag{4.67}
$$

采用欧拉角作为参数时, SO(3) 群积分的权函数式 (4.64) 也可直接由式 (4.47) 计算. 见附录 8.

二、SU(2) 群的线性表示

找一个线性变换群 G 表示的基本方法就是寻找变换群的不变函数空间, 适当选取函数基 ψ^j_μ, 用标量函数变换算符 P_R 作用上去, 得到函数基的线性组合

$$
P_R\psi^j_\mu(x) = \psi^j_\mu(R^{-1}x) = \sum_\nu \psi^j_\nu(x)\ D^j_{\nu\mu}(R)
$$

组合系数排列成方阵 $D^j(R)$, 构成群 G 的一个表示. 如果不变函数空间不存在非平庸的不变子空间, 则此表示是不可约的.

把 SU(2) 群的元素 u 看成是二维复空间的幺正变换

$$
\begin{pmatrix}\xi'\\ \eta'\end{pmatrix} = u\begin{pmatrix}\xi\\ \eta\end{pmatrix},\qquad \begin{pmatrix}\xi''\\ \eta''\end{pmatrix} = u^{-1}\begin{pmatrix}\xi\\ \eta\end{pmatrix}
\tag{4.68}
$$

由 ξ 和 η 的 n 次齐次函数构成的 $n+1$ 维函数空间, 是 SU(2) 群的不变函数空间, 函数基为 $\xi^m\eta^{n-m}$, $m=0,\ 1,\ \cdots,\ n$. 为了将来物理意义清楚, 也为了表示的幺正性, 重新选择描写函数基的指标和函数基的系数

$$
\begin{aligned}
&\psi^j_\mu(\xi,\eta) = \frac{(-1)^{j-\mu}}{\sqrt{(j+\mu)!(j-\mu)!}}\xi^{j-\mu}\eta^{j+\mu}\ ,\\
&j = n/2 = 0,\ 1/2,\ 1,\ 3/2,\ \cdots\ ,\\
&\mu = j-m = j,\ j-1,\ \cdots,\ -(j-1),\ -j
\end{aligned}
\tag{4.69}
$$

现在把标量函数变换算符 P_u 作用到函数基 $\psi^j_\mu(\xi,\eta)$ 上, 由

$$
P_u\psi^j_\mu(\xi,\eta) = \psi^j_\mu(\xi'',\eta'') = \sum_\nu \psi^j_\nu(\xi,\eta)D^j_{\nu\mu}(u)
\tag{4.70}
$$

计算表示矩阵 $D^j_{\nu\mu}(u)$. 因为 $u^{-1} = \mathbf{1}\cos(\omega/2) + \mathrm{i}\sin(\omega/2)\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})$,

$$
u^{-1} = \begin{pmatrix}\cos(\omega/2)+\mathrm{i}n_3\sin(\omega/2) & \sin(\omega/2)\,(n_2+\mathrm{i}n_1)\\ \sin(\omega/2)\,(-n_2+\mathrm{i}n_1) & \cos(\omega/2)-\mathrm{i}n_3\sin(\omega/2)\end{pmatrix}
$$

所以当 $\hat{\boldsymbol{n}}=\vec{e}_3$ 时, 有 $\xi''=\xi\exp(\mathrm{i}\omega/2)$ 和 $\eta''=\eta\exp(-\mathrm{i}\omega/2)$, 得

$$P_u\psi^j_\mu(\xi,\eta)=\frac{(-1)^{j-\mu}}{\sqrt{(j+\mu)!(j-\mu)!}}\left\{\xi\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega/2}\right\}^{j-\mu}\left\{\eta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega/2}\right\}^{j+\mu}=\psi^j_\mu(\xi,\eta)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu\omega}\ ,$$

$$D^j_{\nu\mu}(\vec{e}_3,\omega)=\delta_{\nu\mu}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu\omega} \tag{4.71}$$

当 $\hat{\boldsymbol{n}}=\vec{e}_2$ 时, 有 $\xi''=\xi\cos(\omega/2)+\eta\sin(\omega/2)$ 和 $\eta''=-\xi\sin(\omega/2)+\eta\cos(\omega/2)$, 得

$$\begin{aligned}P_u\psi^j_\mu(\xi,\eta)=&\frac{(-1)^{j-\mu}\left\{\xi\cos(\omega/2)+\eta\sin(\omega/2)\right\}^{j-\mu}\left\{-\xi\sin(\omega/2)+\eta\cos(\omega/2)\right\}^{j+\mu}}{\sqrt{(j+\mu)!(j-\mu)!}}\\
=&(-1)^{j-\mu}\sum_{n=0}^{j-\mu}\frac{\sqrt{(j-\mu)!}\left\{\xi\cos(\omega/2)\right\}^{j-\mu-n}\left\{\eta\sin(\omega/2)\right\}^{n}}{(j-\mu-n)!n!}\\
&\times\sum_{m=0}^{j+\mu}\frac{\sqrt{(j+\mu)!}\left\{-\xi\sin(\omega/2)\right\}^{j+\mu-m}\left\{\eta\cos(\omega/2)\right\}^{m}}{(j+\mu-m)!m!}\end{aligned}$$

求和指标 n 和 m 是整数, 它们的取值范围由使分母不变成无穷大的条件给出. 为了把等式右边表成 ψ^j_ν 的线性组合, 把求和指标 n 和 m 替换成 n 和 ν, 要把式中 ξ 的指数 $2j-n-m$ 换成 $j-\nu$, η 的指数 $n+m$ 换成 $j+\nu$, 即

$$\nu=n+m-j\ ,\qquad \text{取值为}\ j,\ j-1,\ \cdots,\ -j$$

于是得

$$\begin{aligned}P_u\psi^j_\mu(\xi,\eta)=&\sum_{\nu=-j}^{j}\frac{(-1)^{j-\nu}\xi^{j-\nu}\eta^{j+\nu}}{\left\{(j+\nu)!(j-\nu)!\right\}^{1/2}}\\
&\times\sum_n\frac{(-1)^n\left\{(j+\nu)!(j-\nu)!(j+\mu)!(j-\mu)!\right\}^{1/2}}{(j+\nu-n)!(j-\mu-n)!n!(n-\nu+\mu)!}\\
&\times\ \left\{\cos(\omega/2)\right\}^{2j+\nu-\mu-2n}\left\{\sin(\omega/2)\right\}^{2n-\nu+\mu}\end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned}d^j_{\nu\mu}(\omega)\equiv&D^j_{\nu\mu}(\vec{e}_2,\omega)\\
=&\sum_n\frac{(-1)^n\left\{(j+\nu)!(j-\nu)!(j+\mu)!(j-\mu)!\right\}^{1/2}}{(j+\nu-n)!(j-\mu-n)!n!(n-\nu+\mu)!}\\
&\times\ \left\{\cos(\omega/2)\right\}^{2j+\nu-\mu-2n}\left\{\sin(\omega/2)\right\}^{2n-\nu+\mu}\end{aligned} \tag{4.72}$$

$$n\ \text{取}\quad \max\begin{pmatrix}0\\ \nu-\mu\end{pmatrix},\ \cdots\ ,\ \min\begin{pmatrix}j+\nu\\ j-\mu\end{pmatrix}$$

$$D^j_{\nu\mu}(\alpha,\beta,\gamma)=\left\{D^j(\vec{e}_3,\alpha)D^j(\vec{e}_2,\beta)D^j(\vec{e}_3,\gamma)\right\}_{\nu\mu}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\nu\alpha}d^j_{\nu\mu}(\beta)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu\gamma} \tag{4.73}$$

这样, 我们已得到在此不变函数空间中 SU(2) 群的表示 D^j, 其中绕 x_3 轴转动元素对应的表示矩阵是对角化的, 绕 x_2 轴转动元素对应的表示矩阵是实矩阵. 按习惯, 这矩阵的行 (列) 指标按 $j, j-1, \cdots, -(j-1), -j$ 的次序排列. 现在来进一步研究 d^j 矩阵的对称性质. 式 (4.72) 右面, 在指标 ν 和 $-\mu$ 对换时明显保持不变, 在 ω 改号时产生因子 $(-1)^{\mu-\nu}$, 在指标 ν 和 μ 对换时, 再做求和指标替换 $n=n'-\nu+\mu$, 也产生因子 $(-1)^{\mu-\nu}$. 当 ω 等于 π 或 2π 时, 由于 $\cos(\pi/2)=0$ 或 $\sin(\pi)=0$, 求和式只有一项. d^j 矩阵的这些重要性质列于下式

$$\begin{aligned} d^j_{\nu\mu}(\omega) &= d^j_{-\mu-\nu}(\omega) = (-1)^{\mu-\nu} d^j_{\nu\mu}(-\omega) = (-1)^{\mu-\nu} d^j_{\mu\nu}(\omega) \\ &= d^j_{\mu\nu}(-\omega) = (-1)^{\mu-\nu} d^j_{-\nu-\mu}(\omega), \\ d^j_{\nu\mu}(\pi) &= (-1)^{j-\mu}\delta_{\nu(-\mu)}, \qquad d^j_{\nu\mu}(2\pi) = (-1)^{2j}\delta_{\nu\mu}, \\ d^j_{\nu\mu}(\pi-\omega) &= (-1)^{j-\mu} d^j_{-\nu\mu}(\omega) = (-1)^{j+\nu} d^j_{\nu-\mu}(\omega) \end{aligned} \tag{4.74}$$

由式 (4.72) 直接计算得

$$\begin{aligned} d^j_{\mu j}(\beta) &= d^j_{-j-\mu}(\beta) = (-1)^{j-\mu} d^j_{j\mu}(\beta) = (-1)^{j-\mu} d^j_{-\mu-j}(\beta) \\ &= \left\{\frac{(2j)!}{(j+\mu)!(j-\mu)!}\right\}^{1/2} \{\cos(\omega/2)\}^{j+\mu}\{\sin(\omega/2)\}^{j-\mu}, \\ d^\ell_{00}(\beta) &= \sum_{n=0}^{\ell}(-1)^n\left\{\frac{\ell!\,[\cos(\omega/2)]^{\ell-n}\,[\sin(\omega/2)]^n}{n!(\ell-n)!}\right\}^2 \end{aligned} \tag{4.75}$$

现在来分析 SU(2) 群表示 D^j 的性质:

(1) D^j 是 $2j+1$ 维表示, $j=0,\ 1/2,\ 1,\ 3/2,\ \cdots$. $D^0=1$ 是恒等表示, $D^{1/2}(u)=u$ 是 SU(2) 群的自身表示.

(2) j 为整数时, D^j 是 SO(3) 群的单值表示, SU(2) 群的非真实表示, j 为半奇数时, D^j 是 SO(3) 群的双值表示, SU(2) 群的真实表示.

(3) d^j 是实正交矩阵, D^j 是幺正表示.

(4) 由于绕 x_3 轴转动元素的表示矩阵是对角的, 由此容易算得转角为 ω 的类在表示 D^j 中的特征标

$$\chi^j(\omega) = \sum_{\mu=-j}^{j} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu\omega} = \sum_{\mu=-j}^{j} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu\omega} = \frac{\sin\{(j+1/2)\omega\}}{\sin(\omega/2)} \tag{4.76}$$

它满足不等价不可约表示特征标的正交关系式 (4.55). 因此, 不同 j 的表示 D^j 都是 SU(2) 群的不等价不可约表示. 下面证明, 它包括了 SU(2) 群的所有有限维不等价不可约表示.

证明 用反证法. 设另有特征标为 $\chi(\omega)$ 的不可约表示, 它与所有 D^j 表示不等价, 则

$$
\begin{aligned}
0 &= \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\omega \ \sin^2(\omega/2)\chi^j(\omega)^*\chi(\omega) \\
&= \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\omega \ \sin\{(j+1/2)\omega\}\{\chi(\omega)\sin(\omega/2)\}
\end{aligned}
$$

由傅里叶 (Fourier) 级数理论知, 在区间 $[0,\ 2\pi]$ 内, $\sin\{(j+1/2)\omega\}$ 构成完备函数系, 其中 j 取非负半整数. 因此与它们都正交的非零函数 $\{\chi(\omega)\sin(\omega/2)\}$ 是不存在的. 证完.

参数用欧拉角表达时, SU(2) 群不等价不可约表示矩阵元素的正交关系为

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{16\pi^2}\int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{d}\alpha \int_0^{\pi} \mathrm{d}\beta \ \sin\beta \int_{-2\pi}^{2\pi} \mathrm{d}\gamma \ D^i_{\mu\rho}(\alpha,\beta,\gamma)^* D^j_{\nu\lambda}(\alpha,\beta,\gamma) = \frac{1}{2j+1}\delta_{ij}\delta_{\mu\nu}\delta_{\rho\lambda}, \\
&\frac{1}{2}\int_0^{\pi} \mathrm{d}\beta \ \sin\beta d^i_{\mu\nu}(\beta) d^j_{\mu\nu}(\beta) = \frac{1}{2j+1}\ \delta_{ij}\ .
\end{aligned}
\tag{4.77}
$$

(5) 把表示矩阵按参数展开, 参数的一级项给出生成元. 在 $d^j(\omega)$ 的展开中, 只需取 $\sin(\omega/2)$ 的零次项和一次项. 按式 (4.16), 绕 x_1 轴的转动可用绕 x_2 和 x_3 轴的转动表出

$$
\begin{aligned}
&D^j_{\nu\mu}(\vec{e}_3,\omega) = \delta_{\nu\mu}\{1 - \mathrm{i}\mu\omega + \ \cdots\}, \\
&d^j_{\nu\mu}(\omega) = \delta_{\nu\mu} + \frac{\omega}{2}\left\{\delta_{\nu(\mu-1)}\Gamma^j_\mu - \delta_{\nu(\mu+1)}\Gamma^j_\nu\right\}, \\
&D^j_{\nu\mu}(\vec{e}_1,\omega) = \left\{D^j(\vec{e}_3,-\pi/2)d^j(\omega)D^j(\vec{e}_3,\pi/2)\right\}_{\nu\mu} \\
&\qquad = \delta_{\nu\mu} + \frac{\omega}{2}\left\{-\mathrm{i}\delta_{\nu(\mu-1)}\Gamma^j_\mu - \mathrm{i}\delta_{\nu(\mu+1)}\Gamma^j_\nu\right\}, \\
&\Gamma^j_\nu = \Gamma^j_{-\nu+1} = \{(j+\nu)(j-\nu+1)\}^{1/2}, \\
&\qquad \left(I^j_1\right)_{\nu\mu} = \frac{1}{2}\left[\delta_{\nu(\mu+1)}\Gamma^j_\nu + \delta_{\nu(\mu-1)}\Gamma^j_{-\nu}\right], \\
&\qquad \left(I^j_2\right)_{\nu\mu} = -\frac{\mathrm{i}}{2}\left[\delta_{\nu(\mu+1)}\Gamma^j_\nu - \delta_{\nu(\mu-1)}\Gamma^j_{-\nu}\right], \\
&\qquad \left(I^j_3\right)_{\nu\mu} = \mu\delta_{\nu\mu}
\end{aligned}
\tag{4.78}
$$

注意, $\delta_{\nu(\mu-1)}\Gamma^j_{-\nu} = \delta_{\nu(\mu-1)}\Gamma^j_\mu$. 比较生成元可知, D^1 表示等价于 SO(3) 群的自身表示 (见第一章习题 4)

$$
\begin{aligned}
&M^{-1}T_a M = I^1_a\ , \qquad a = 1,\ 2,\ 3, \\
&M^{-1}R(\alpha,\beta,\gamma)M = D^1(\alpha,\beta,\gamma)\ ,
\end{aligned}
\qquad
M = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ -\mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}
\tag{4.79}
$$

其中, T_a 由式 (4.11) 和 (4.12) 给出. 物理中常引入升降算符 $I_\pm$

$$\begin{aligned}\left(I_+^j\right)_{\nu\mu} &= \left(I_1^j + \mathrm{i}I_2^j\right)_{\nu\mu} = \delta_{\nu(\mu+1)}\Gamma_\nu^j = \delta_{\nu(\mu+1)}\Gamma_{-\mu}^j \ , \\ \left(I_-^j\right)_{\nu\mu} &= \left(I_1^j - \mathrm{i}I_2^j\right)_{\nu\mu} = \delta_{\nu(\mu-1)}\Gamma_\mu^j = \delta_{\nu(\mu-1)}\Gamma_{-\nu}^j\end{aligned} \tag{4.80}$$

D^j 的表示空间包含 $2j+1$ 个状态, 升 (降) 算符 $I_+^j(I_-^j)$ 的矩阵元为

$$\Gamma_j^j = \sqrt{(2j)(1)}, \qquad \Gamma_{j-1}^j = \sqrt{(2j-1)(2)}, \qquad \Gamma_{j-n}^j = \sqrt{(2j-n)(n+1)} \tag{4.81}$$

(6) 由于 D^j 的特征标是实数, D^j 是自共轭表示. 在复共轭表示中, 绕 x_3 轴转动的角度 α 和 γ 改了符号, 而绕 x_2 轴转动的角度 β 不变, 可见联系 D^j 和 D^{j*} 的相似变换正好是绕 x_2 轴转动 π 角的变换

$$\begin{aligned}d^j(\pi)^{-1}D^j(\vec{e}_3,\alpha)d^j(\pi) &= D^j(\vec{e}_3,-\alpha) = D^j(\vec{e}_3,\alpha)^* \ , \\ d^j(\pi)^{-1}d^j(\beta)d^j(\pi) &= d^j(\beta) = d^j(\beta)^* \ , \\ d^j(\pi)^{-1}D^j(\alpha,\beta,\gamma)d^j(\pi) &= D^j(\alpha,\beta,\gamma)^*\end{aligned} \tag{4.82}$$

由式 (4.74) 知, 当 $j=\ell$ 是整数时, $d^\ell(\pi)$ 是对称矩阵, 因而 D^ℓ 是实表示, 而当 j 是半奇数时, $d^j(\pi)$ 是反对称矩阵, D^j 是自共轭而非实表示.

附录 9 列出几个特殊的 d^j 矩阵供查用.

三、O(3) 群的不等价不可约表示

O(3) 群是混合李群, 群空间按群元素的行列式为 1 还是 -1, 分成两片. 行列式为 1 的那片, 相应元素是固有转动, 记作 R, 它们构成 SO(3) 群, 是 O(3) 群的不变子群. 行列式为 -1 的那片, 相应元素是非固有转动, 记作 $R'=\sigma R$, σ 是空间反演, 它们构成 SO(3) 群的陪集. 有了 SO(3) 群的表示, 只要再知道 σ 元素的表示矩阵, 就知道 O(3) 群的表示. 这里我们仅限于讨论 O(3) 群的单值表示, ℓ 取非负整数.

因为 σ 可与任何转动元素对易, 所以它在不可约表示中的表示矩阵必是常数矩阵. 又由于 $\sigma^2=E$, 这常数只能取 ± 1. 事实上, 设 SO(3) 群的不可约表示 D^ℓ 表示空间的基为 ψ_m^ℓ, 取 $\phi_m^{\ell\pm} \sim \psi_m^\ell \pm \sigma\psi_m^\ell$, 得 $\sigma\phi_m^{\ell\pm} = \pm\phi_m^{\ell\pm}$. 以 $\phi_m^{\ell\pm}$ 为基得到 O(3) 群的两个不等价不可约表示 $D^{\ell+}$ 和 $D^{\ell-}$, 表示矩阵为

$$D^{\ell\pm}(R) = D^\ell(R) \ , \qquad D^{\ell\pm}(\sigma) = \pm\mathbf{1} \ , \qquad D^{\ell\pm}(\sigma R) = \pm D^\ell(R) \tag{4.83}$$

这是找混合李群不等价不可约表示的一般方法.

四、球函数

下面讨论 SO(3) 群不可约表示的简单物理应用. 球对称系统的对称变换群是 SO(3) 群, 系统哈密顿量在转动变换中保持不变

$$H(x)P_R = P_R H(x)$$

设能级 E 是 n 重简并, 有 n 个线性无关的本征函数 $\psi_\mu(x)$

$$H(x)\psi_\mu(x) = E\psi_\mu(x)$$

经转动变换, $P_R\psi_\mu(x)$ 仍是同一能级的本征函数

$$H(x)\left\{P_R\psi_\mu(x)\right\} = P_R H(x)\psi_\mu(x) = EP_R\psi_\mu(x)$$

因而它必可按此函数基 $\psi_\mu(x)$ 展开, 组合系数构成表示 D[SO(3)]

$$P_R\psi_\mu(x) = \psi_\mu(R^{-1}x) = \sum_\nu \psi_\nu(x)D_{\nu\mu}(R) \tag{4.84}$$

此表示一般是可约表示, 把它按 SO(3) 群的不可约表示约化, 它的生成元 I_a 也同时约化, 它的特征标 $\chi(\omega)$ 则做级数展开

$$\begin{aligned} &X^{-1}D(R)X = \bigoplus_\ell a_\ell D^\ell(R), \\ &X^{-1}I_aX = \bigoplus_\ell a_\ell I_a^\ell, \qquad \chi(R) = \sum_\ell a_\ell\chi^\ell(R) \end{aligned} \tag{4.85}$$

因为转动 2π 角后, 系统恢复原状, 所以展开式中只能出现 SO(3) 群单值表示 D^ℓ, ℓ 是非负整数. a_ℓ 可用特征标积分来计算

$$\begin{aligned} a_\ell &= \frac{2}{\pi}\int_0^\pi \mathrm{d}\omega\ \sin^2(\omega/2)\chi^\ell(\omega)\chi(\omega) \\ &= \frac{2}{\pi}\int_0^\pi \mathrm{d}\omega\ \sin(\omega/2)\sin\{(\ell+1/2)\omega\}\chi(\omega) \end{aligned} \tag{4.86}$$

把 a_ℓ 代入生成元的相似变换式 (4.85), 先取下标 $a=3$, 再取 $a=\pm$, 可基本确定相似变换矩阵 X, 余下的未定参数可以按方便选定. X 矩阵的行指标为 μ, 列指标为 ℓmr. 当 $a_\ell > 1$ 时需引入 r 来区分重表示. 用 X 矩阵组合波函数, 可得属确定不可约表示 D^ℓ m 行的定态波函数

$$\begin{aligned} &\psi^\ell_{mr}(x) = \sum_\mu \psi_\mu(x)X_{\mu,\ell mr} \\ &P_R\psi^\ell_{mr}(x) = \psi^\ell_{mr}(R^{-1}x) = \sum_{m'} \psi^\ell_{m'r}(x)D^\ell_{m'm}(R) \end{aligned} \tag{4.87}$$

这就是说, 如果系统各向同性, 对称变换群是 SO(3) 群, 则定态波函数可组合成属 SO(3) 群不可约表示确定行的函数 $\psi^\ell_{mr}(x)$. 现在讨论这样函数的物理意义. 这里的坐标 x 可做两种理解: 一种是把 x 理解为若干粒子坐标的集合, 为确定起见, 例如 x 代表两个粒子的坐标 $x^{(1)}$ 和 $x^{(2)}$, 则 P_R 让两个粒子同时做转动变换 R,

$P_R = P_R^{(1)}P_R^{(2)}$, 它的微量微分算符是两粒子轨道角动量算符之和, 即系统的总轨道角动量算符 L_a. 另一种认为系统像一个质点, P_R 的微量微分算符就是系统的总轨道角动量算符. 式 (4.87) 说明, P_R 在函数基 $\psi^\ell_{mr}(x)$ 中的矩阵形式是 D^ℓ, 它的生成元是 I^ℓ_a. 由式 (4.78) 和 (4.80) 得

$$\begin{aligned} &L_3\psi^\ell_{mr}(x) = m\psi^\ell_{mr}(x), \\ &L_\pm\psi^\ell_{mr}(x) = \Gamma^\ell_{\mp m}\psi^\ell_{(m\pm 1)r}(x), \\ &L^2\psi^\ell_{mr}(x) = \ell(\ell+1)\psi^\ell_{mr}(x) \end{aligned} \tag{4.88}$$

其中

$$\begin{aligned} L_\pm &= L_1 \pm \mathrm{i}L_2\ , \\ L^2 &\equiv \sum_{a=1}^{3}\ (L_a)^2 = L_3^2 + (L_+L_- + L_-L_+)/2 \\ &= (L_3)^2 + L_3 + L_-L_+ = (L_3)^2 - L_3 + L_+L_- \end{aligned} \tag{4.89}$$

因此, 属三维转动群不可约表示 D^ℓ m 行的函数, 是轨道角动量平方 L^2 和轨道角动量沿 x_3 轴投影 L_3 的共同本征函数, 本征值分别为 $\ell(\ell+1)$ 和 m. 属不可约表示 D^ℓ 表示空间的函数是轨道角动量平方 L^2 的本征函数, 本征值为 $\ell(\ell+1)$. 在量子力学中, ℓ 称为角动量量子数, m 称为磁量子数. 现在我们又进一步看到, L^2 和 L_3 的共同本征函数 $\psi^\ell_m(x)$ 在转动变换中的变换规律是由表示 D^ℓ 来描写的. 对各向同性系统的能量本征函数, 在不同的方法中有不同的理解, 虽然最后结果是相同的. 在量子力学中, 它是一套完备力学量 H, L^2 和 L_3 的共同本征函数. 在数理方法中, 用分离变量法计算得这本征函数. 在群论中, 它是属三维转动群不可约表示确定行的函数.

在这组函数基 $\psi^\ell_{mr}(x)$ 中, L_+ 是升算符, 它把函数基 $\psi^\ell_{mr}(x)$ 的磁量子数 m 增加 1, L_- 是降算符, 它把函数基的磁量子数减少 1.

现在用群论方法研究一个在中心力场中运动的单粒子系统, 对称变换群是 O(3) 群, 定态波函数可组合成属 SO(3) 群不可约表示确定行的函数 $\psi^\ell_m(x)$, 其中 x 代表单粒子在三维空间的坐标. 若取球坐标, $x = (r,\ \theta,\ \varphi)$, 在 x_3 轴上的点为 $x_0 = (r,\ 0,\ 0)$, 转动 $T = R(\varphi,\ \theta,\ \gamma)$ 把点 x_0 转到 x 位置, $x = Tx_0$. 在转动变换中 $\psi^\ell_m(x)$ 按式 (4.87) 变换

$$\begin{aligned} \psi^\ell_m(x) &= \psi^\ell_m(Tx_0) = P_{T^{-1}}\psi^\ell_m(x_0) = \sum_{m'}\ \psi^\ell_{m'}(x_0)D^\ell_{mm'}(T)^* \\ &= \sum_{m'}\ \psi^\ell_{m'}(x_0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}d^\ell_{mm'}(\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m'\gamma} \end{aligned} \tag{4.90}$$

既然等式左面与 γ 角无关, 等式右面也必须不依赖于 γ 角. 现在右面的求和式中, 除 $m' = 0$ 的项外, 都以指数方式依赖于 γ 角, 而且这些指数函数是互相线性无关

的, 因而这些项的系数只能为零

$$\psi^{\ell}_{m'}(x_0) = 0 \, , \qquad \text{当} \ m' \neq 0$$

对 $m' = 0$ 的项, 提出归一化系数, 令

$$\psi^{\ell}_{m}(x_0) = \delta_{m0} \left(\frac{2\ell+1}{4\pi} \right)^{1/2} \phi_{\ell}(r) \tag{4.91}$$

其中, $\phi_{\ell}(r)$ 仅是矢径长 r 的函数, 当然函数形式依赖于 ℓ. 代入式 (4.90), 得

$$\psi^{\ell}_{m}(x) = \phi_{\ell}(r) \left(\frac{2\ell+1}{4\pi} \right)^{1/2} D^{\ell}_{m0}(\varphi, \theta, 0)^* \tag{4.92}$$

即属 SO(3) 群不可约表示 D^{ℓ} m 行的单粒子波函数 $\psi^{\ell}_{m}(x)$ 必可分解为径向函数 $\phi_{\ell}(r)$ 和角度函数 $\mathrm{Y}^{\ell}_{m}(\theta, \varphi)$ 的乘积

$$\mathrm{Y}^{\ell}_{m}(\theta, \varphi) \equiv \left(\frac{2\ell+1}{4\pi} \right)^{1/2} D^{\ell}_{m0}(\varphi, \theta, 0)^* = \left(\frac{2\ell+1}{4\pi} \right)^{1/2} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} d^{\ell}_{m0}(\theta) \tag{4.93}$$

因为径向函数在转动变换中保持不变, 在变换中相当一个常系数, 所以这角度函数也是属不可约表示 D^{ℓ} m 行的函数, 是 L^2 和 L_3 的共同本征函数, 量子力学中称它为球函数. 由式 (4.77) 知, 球函数对角度积分是正交归一的

$$\begin{aligned}
&\int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{d}\varphi \int_{0}^{\pi} \mathrm{d}\theta \ \sin\theta \mathrm{Y}^{\ell}_{m}(\theta, \varphi)^* \mathrm{Y}^{\ell'}_{m'}(\theta, \varphi) \\
&= \frac{\{(2\ell+1)(2\ell'+1)\}^{1/2}}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{d}\varphi \int_{0}^{\pi} \mathrm{d}\theta \ \sin\theta D^{\ell}_{m0}(\varphi, \theta, 0)^* D^{\ell'}_{m'0}(\varphi, \theta, 0) \\
&= \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}
\end{aligned} \tag{4.94}$$

由 d^{ℓ} 函数的对称性质式 (4.74) 得

$$\mathrm{Y}^{\ell}_{m}(\theta, \varphi)^* = \left(\frac{2\ell+1}{4\pi} \right)^{1/2} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi} d^{\ell}_{m0}(\theta) = (-1)^m \mathrm{Y}^{\ell}_{-m}(\theta, \varphi) \tag{4.95}$$

定义勒让德 (Legendre) 函数

$$\mathrm{P}_{\ell}(\cos\theta) = \left(\frac{4\pi}{2\ell+1} \right)^{1/2} \mathrm{Y}^{\ell}_{0}(\theta, 0) = d^{\ell}_{00}(\theta) \tag{4.96}$$

它满足正交性质

$$\int_{0}^{\pi} \mathrm{d}\theta \ \sin\theta \mathrm{P}_{\ell}(\cos\theta) \mathrm{P}_{\ell'}(\cos\theta) = \frac{2\delta_{\ell\ell'}}{2\ell+1} \tag{4.97}$$

在空间反演中, $x \longrightarrow -x$, $\theta \longrightarrow \pi-\theta$, 和 $\varphi \longrightarrow \pi+\varphi$,

$$\begin{aligned} Y_m^\ell(\pi-\theta,\pi+\varphi) &= \left(\frac{2\ell+1}{4\pi}\right)^{1/2} e^{-im(\pi+\varphi)} d_{m0}^\ell(\pi-\theta) \\ &= (-1)^\ell Y_m^\ell(\theta,\varphi) \end{aligned} \tag{4.98}$$

球函数有确定的宇称 $(-1)^\ell$. 这是系统具有空间反演不变性的结果.

值得强调的是, 球函数 $Y_m^\ell(\theta,\varphi)$ 乘上 r^ℓ 后是直角坐标 x_1, x_2 和 x_3 的 ℓ 次齐次多项式, 称为球谐多项式. 附录 10 列出用直角坐标表达的若干球谐多项式 ($\ell \leqslant 4$) 的具体形式.

*4.5　李 氏 定 理

我们已经系统地研究了 SU(2) 群和 SO(3) 群的不等价不可约表示及其生成元, 现在再回过头来学习作为李群理论的三个基本定理, 它确立了生成元在李群理论中的重要地位和生成元的基本性质.

一、李氏第一定理

李氏第一定理要解决无穷小元素如何决定简单李群的性质. 设表示 $D(G)$ 是存在的, I_j 是它的生成元, 如何由 I_j 把表示矩阵 $D(R)$ 具体计算出来呢?

定理一　简单李群的线性表示完全由它的生成元决定.

证明　设 $RS=T$, $t_j=f_j(r;s)$. 右乘 S^{-1}, $R=TS^{-1}$. 在表示 $D(G)$ 中, $D(R)=D(T)D(S^{-1})$. 固定 S, 两边对参数 r_k 求导

$$\frac{\partial D(R)}{\partial r_k} = \frac{\partial D(T)}{\partial r_k} D(S^{-1}) = \sum_j \frac{\partial D(T)}{\partial t_j} \frac{\partial f_j(r;s)}{\partial r_k} D(S^{-1})$$

然后取 $S^{-1}=R$, $T=E$, 由生成元的定义式 (4.24) 得

$$\frac{\partial D(R)}{\partial r_k} = -i\left\{\sum_j I_j S_{jk}(r)\right\} D(R) \tag{4.99}$$

$$S_{jk}(r) \equiv \left.\frac{\partial f_j(r;s)}{\partial r_k}\right|_{s=\overline{r}} \tag{4.100}$$

对于给定的李群和选定的群参数, $S(r)$ 是一个确定的矩阵函数, 与具体的线性表示无关. 比较式 (4.48), 这矩阵 $S(r)$ 的行列式就是群元素积分变换的雅可比行列式, 因而 $S(r)$ 是非奇矩阵, 存在逆矩阵 $\overline{S}$

$$\sum_\ell \overline{S}_{j\ell}(r) S_{\ell k}(r) = \delta_{jk} \tag{4.101}$$

若式 (4.100) 微商后 R 取恒元, 则得

$$S_{jk}(E) = \delta_{jk} \tag{4.102}$$

式 (4.99) 回到式 (4.24).

设表示 $D(G)$ 是 m 维的, 式 (4.99) 是关于 m^2 个函数 $D_{\mu\nu}(R)$ 的 m^2 个一阶联立偏微分方程, 由 m^2 个边界条件

$$D(R)|_{R=E} = \mathbf{1} \tag{4.103}$$

可以用下面方法解出 $D(R)$. 因为解是存在的, 与积分路径无关, 所以可选取特殊的路径, 使路径的每一段都只有一个参数在变化, 于是方程是一阶常微分方程, 容易求解. 例如, 先只让 r_1 变化, 其余 r_j 都等于零, 由方程 (4.99) 和边界条件式 (4.103) 可解得 $D(r_1,\ 0,\ \cdots,\ 0)$. 再以此为边界条件, 取 r_1 固定, r_2 变化, 其余 $r_j = 0$, 由方程 (4.99) 解得 $D(r_1,\ r_2,\ 0,\ \cdots,\ 0)$. 以此类推, 可算得 $D(R)$. 证完.

这一定理从数学上严格描述了无穷小元素是如何决定李群的局域性质的, 也就是前面所说的"无穷多个无穷小元素乘积"的数学描述. 在上面求解过程的每一步, 都是求解矩阵的一阶常微分方程, 解可表为生成元线性组合的矩阵指数函数, 因而最后 $D(R)$ 可表为生成元各种线性组合的矩阵指数函数之乘积. 另一方面, 数学上证明了指数映照定理 (也参看附录 40): 对紧致的简单李群, 每个群元素 R 都分属于只含一个实参数的子李群, $D(R)$ 也就可表为这个子李群生成元的矩阵指数函数. 例如, SO(3) 群的任意元素都分别是绕空间给定方向 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 的转动变换, 分属绕 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向转动群 SO(2), 这是 SO(3) 群的子李群. 式 (4.16) 指出这个子李群在自身表示中的生成元是 $\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \vec{T}$, 它的微量微分算符是轨道角动量在 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向的分量 $\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \vec{L}$. 下面例子具体计算它的线性表示.

例 绕 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向转动群 SO(2) 的线性表示.

SO(2) 群是一阶阿贝尔紧致李群. 取转动角 ω 作为参数

$$f(\omega_1, \omega_2) = \omega_1 + \omega_2\ , \qquad S(\omega_1) = \left. \frac{\partial f(\omega_1, \omega_2)}{\partial \omega_1} \right|_{\omega_2 = -\omega_1} = 1$$

设表示 $D(\hat{\boldsymbol{n}}, \omega)$ 的生成元是 I, 方程 (4.99) 为

$$\frac{\partial D(\hat{\boldsymbol{n}}, \omega)}{\partial \omega} = -\mathrm{i} I D(\hat{\boldsymbol{n}}, \omega)\ , \qquad D(\hat{\boldsymbol{n}}, 0) = \mathbf{1}$$

解得

$$D(\hat{\boldsymbol{n}}, \omega) = \exp(-\mathrm{i} I \omega) \tag{4.104}$$

把 I 对角化, $D(\hat{\boldsymbol{n}}, \omega)$ 也是对角矩阵, 它是一维表示的直和, 即是可约表示. 由单值性条件 $D(\omega + 2\pi) = D(\omega)$, 定出 I 的本征值是整数. 阿贝尔群的不可约表示都是一维表示, SO(2) 群的不可约表示用整数 m 标记

$$D^m(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)=\exp(-\mathrm{i}m\omega) \tag{4.105}$$

这就是式 (4.31). 如果知道 SO(3) 群中绕三个坐标轴方向转动的生成元 I_a, 则 $I=\sum_a I_a n_a$, 代入式 (4.104) 就得到 SO(3) 群中绕 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向转动元素的表示矩阵

$$D(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)=\exp(-\mathrm{i}\sum_a I_a n_a\omega)=\exp(-\mathrm{i}\sum_a I_a\omega_a) \tag{4.106}$$

对维数不高的表示, 采取一定的技巧, 是可以用此式直接计算表示矩阵的 (见习题第 2 题). 但对一般的表示, 除非生成元是对角化的, 否则真正要从上式算出表示矩阵一般形式, 是一件很难的事.

此外, 读者应该理解, 对实际的李群, 组合函数 $f_j(r;s)$ 的具体形式很复杂, 即使对最简单的非阿贝尔紧致李群 SO(3), 没有人去写出这组合函数的具体形式来, 也没有人去计算 $S_{jk}(r)$ 函数. 不是说绝对写不出来, 而是说没有必要去写, 因为李氏第一定理的重点在于理论研究, 而不是实际计算. 那么, 李氏第一定理究竟解决什么问题呢? 李氏第一定理告诉我们, 简单李群的生成元决定了李群任意元素的表示矩阵, 原来必须由表示矩阵来判定的表示性质, 现在只用生成元就能判定. 这些性质列举如下.

推论一 若简单李群两个表示的所有生成元间都存在同一相似变换关系

$$\overline{I_j}=X^{-1}I_jX$$

则此两表示等价.

推论二 简单李群的表示不可约的充要条件是表示空间不存在对所有生成元不变的子空间.

推论三 设 $I_j^{(1)}$ 和 $I_j^{(2)}$ 是简单李群两个不等价不可约表示的生成元, 表示的维数分别为 m_1 和 m_2, 若存在 $m_1\times m_2$ 矩阵 X, 对所有生成元都满足

$$I_j^{(1)}X=XI_j^{(2)}$$

则 $X=0$.

推论四 与简单李群不可约表示的所有生成元都对易的矩阵必为常数矩阵.

这些性质的证明都是根据方程 (4.99), 在给定边界条件式 (4.103) 下, 解是唯一的. 对混合李群, 还要选群空间每一连通片的一个代表元素, 要求它的表示矩阵和生成元一起满足上述条件, 上述性质才能成立.

二、李氏第二定理

李氏第二定理要解决的问题是, 什么样的一组矩阵才可以作为简单李群的生成元, 由它们可以唯一地解得表示矩阵 $D(R)$, 这组表示矩阵应该满足与群元素相同的

乘积规则, 而且确实以这组矩阵为生成元. 由于无穷小元素只描写李群的局域性质, 对于群空间是多连通的李群 G, 它与其覆盖群有相同的无穷小元素. 用满足一定条件的一组矩阵作为生成元, 解得的线性表示可能是覆盖群的真实表示, 是群 G 的多值表示.

定理二 李群线性表示的生成元满足共同的对易关系

$$I_jI_k - I_kI_j = \mathrm{i}\sum_{\ell} C_{jk}{}^{\ell} I_{\ell} \tag{4.107}$$

$$C_{jk}{}^{\ell} = \left\{ \frac{\partial S_{\ell k}(r)}{r_j} - \frac{\partial S_{\ell j}(r)}{r_k} \right\}\Bigg|_{r=0} \tag{4.108}$$

反之, 满足此对易关系的 g 个矩阵, 可以作为李群表示的一组生成元, 确定简单李群的一个单值或多值表示.

证明 对于给定的李群和选定的实参数, $C_{jk}{}^{\ell}$ 是一组确定的实数, 称为李群的结构常数, 它们与具体的线性表示无关.

将式 (4.99) 对 r_j 求导

$$\frac{\partial^2 D(R)}{\partial r_j \partial r_k} = -\mathrm{i}\sum_{\ell} I_{\ell}\frac{\partial S_{\ell k}(r)}{\partial r_j} D(R) - \sum_{\ell p} I_{\ell} I_p S_{\ell k}(r) S_{pj}(r) D(R)$$

交换指标 j 和 k 得

$$\frac{\partial^2 D(R)}{\partial r_k \partial r_j} = -\mathrm{i}\sum_{\ell} I_{\ell}\frac{\partial S_{\ell j}(r)}{\partial r_k} D(R) - \sum_{\ell p} I_{\ell} I_p S_{\ell j}(r) S_{pk}(r) D(R)$$

根据微分方程理论, 在给定的边界条件式 (4.103) 下, 沿任意两条可通过在群空间内连续变形达到重合的路径, 由方程 (4.199) 得到相同解 $D(R)$ 的充要条件是

$$\frac{\partial^2 D(R)}{\partial r_j \partial r_k} = \frac{\partial^2 D(R)}{\partial r_k \partial r_j} \tag{4.109}$$

因此

$$\sum_{\ell p} \{I_{\ell} I_p - I_p I_{\ell}\} S_{\ell j}(r) S_{pk}(r) = \mathrm{i}\sum_{\ell} I_{\ell} \left\{ \frac{\partial S_{\ell k}(r)}{\partial r_j} - \frac{\partial S_{\ell j}(r)}{\partial r_k} \right\}$$

右乘 S 的逆矩阵 $\overline{S}$[见式 (4.101)], 得

$$I_jI_k - I_kI_j = \mathrm{i}\sum_{\ell} I_{\ell} \left\{ \sum_{pq} \left(\frac{\partial S_{\ell q}(r)}{\partial r_p} - \frac{\partial S_{\ell p}(r)}{\partial r_q} \right) \overline{S}_{pj}(r) \overline{S}_{qk}(r) \right\} \tag{4.110}$$

等式左面与 R 无关, 等式右面花括号里的量也必须与 R 无关. 取 $R = E$, 利用式 (4.102), 花括号里的量正是结构常数 $C_{jk}{}^{\ell}$.

反过来, 如果 g 个矩阵 I_j 满足对易关系式 (4.107), 则式 (4.110) 和 (4.109) 也成立, 因而可唯一解得 $D(R)$.

现在再来证明这样解得的 $D(R)$ 满足群元素的乘积规则, 即对于 $RS=T$, 有 $D(R)D(S)=D(T)$, 从而 $D(R)$ 的集合构成群 G 的一个表示, 且以这组矩阵 I_j 为生成元. 设求解 $D(T)$ 时取如下积分路径, 先由 E 积分到 S, 得矩阵 $D(S)$, 再以此为边界条件, 由 S 积分到 T

$$\frac{\partial D(T)}{\partial t_\ell}=-\mathrm{i}\sum_j I_j S_{j\ell}(t)D(T)\ , \qquad D(T)|_{T=S}=D(S)$$

因此

$$\begin{aligned}\frac{\partial D(T)}{\partial r_k}&=\sum_\ell \frac{\partial D(T)}{\partial t_\ell}\frac{\partial f_\ell(r;s)}{\partial r_k}\\&=-\mathrm{i}\sum_j I_j\left\{\sum_\ell S_{j\ell}(t)\frac{\partial f_\ell(r;s)}{\partial r_k}\right\}D(T),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\sum_\ell S_{j\ell}(t)\frac{\partial f_\ell(r;s)}{\partial r_k}&=\sum_\ell \left.\frac{\partial f_j(t;u)}{\partial t_\ell}\right|_{u=\bar{t}}\frac{\partial f_\ell(r;s)}{\partial r_k}\\&=\left.\frac{\partial f_j\left\{f(r;s);u\right\}}{\partial r_k}\right|_{u=\bar{t}}=\left.\frac{\partial f_j\left\{r;f(s;u)\right\}}{\partial r_k}\right|_{f(s;u)=\bar{r}}=S_{jk}(r)\end{aligned}$$

另一方面, 用 $D(S)$ 右乘式 (4.99) 和 (4.103) 得

$$\begin{aligned}&\frac{\partial D(R)D(S)}{\partial r_k}=-\mathrm{i}\sum_j I_j S_{jk}(r)D(R)D(S),\\&D(R)D(S)|_{RS=S}=D(S)\end{aligned}$$

$D(T)$ 和 $D(R)D(S)$ 满足相同的方程和边界条件, 因而它们相等. 将式 (4.99) 中的 R 取作 E, 利用式 (4.102) 得

$$\left.\frac{\partial D(R)}{\partial r_k}\right|_{R=E}=-\mathrm{i}I_k$$

即以 I_k 为生成元. 证完.

因为生成元是微量微分算符在表示空间中的矩阵形式, 所以微量微分算符也满足相同的对易关系

$$\left[I_j^{(0)},\ I_k^{(0)}\right]=\mathrm{i}\sum_\ell C_{jk}{}^{\ell} I_\ell^{(0)} \tag{4.111}$$

对于给定的李群和选定的参数, 李群的结构常数通常不是根据式 (4.108) 来计算的, 而是选择李群的一个已知的真实表示, 例如自身表示, 找出生成元的具体形

式, 计算它们的对易关系, 从而确定结构常数. SO(3) 群的微量微分算符是轨道角动量算符, 它们满足角动量算符典型的对易关系

$$\begin{aligned} &[L_a,\ L_b] = \mathrm{i}\sum_d \epsilon_{abd}L_d\ , \qquad && C_{ab}{}^d = \epsilon_{abd}, \\ &[L_3,\ L_\pm] = \pm L_\pm\ , && [L_+,\ L_-] = 2L_3 \end{aligned} \tag{4.112}$$

结构常数 $C_{ab}{}^d$ 就是完全反对称张量 ϵ_{abd}. SO(3) 群和 SU(2) 群任何表示的生成元都必须满足此对易关系. 容易检验, 式 (4.78) 给出的生成元确实满足此对易关系. SO(3) 群的自身表示生成元 T_a[见式 (4.11) 和 (4.12)] 也满足此对易关系. 事实上, 在量子力学中, 就根据此对易关系, 在 I_3 和 $I^2=\sum_a I_a^2$ 对角化的表象里, 计算出生成元的矩阵形式 (4.78), 称为角动量的矩阵形式. 附录 11 概略地解释了这种计算方法. 第七章介绍的方块权图方法实际是这方法的推广.

三、李氏第三定理

作为李群的结构常数应该满足什么条件? 由定义式 (4.107) 看到

$$C_{jk}{}^{\ell} = -C_{kj}{}^{\ell} \tag{4.113}$$

此外, 生成元还满足雅可比 (Jacobi) 恒等式

$$\begin{aligned} &[[I_j,\ I_k],\ I_\ell] + [[I_k,\ I_\ell],\ I_j] + [[I_\ell,\ I_j],\ I_k] \\ &= I_jI_kI_\ell - I_kI_jI_\ell - I_\ell I_jI_k + I_\ell I_kI_j + I_kI_\ell I_j - I_\ell I_kI_j \\ &\quad - I_jI_kI_\ell + I_jI_\ell I_k + I_\ell I_jI_k - I_jI_\ell I_k - I_kI_\ell I_j + I_kI_jI_\ell \\ &= 0 \end{aligned} \tag{4.114}$$

把式 (4.107) 代入并整理, 由于生成元线性无关, 得

$$\sum_p \left\{ C_{jk}{}^p C_{p\ell}{}^q + C_{k\ell}{}^p C_{pj}{}^q + C_{\ell j}{}^p C_{pk}{}^q \right\} = 0 \tag{4.115}$$

定理三 李群的结构常数满足式 (4.113) 和 (4.115), 反之, 对满足此两式的一组实常数, 一定存在相应的李群, 以这组常数作为结构常数.

根据定理三, 可以由结构常数对李群进行分类. 我们将在第七章讨论这一问题. 结构常数相同的李群有相同的局域性质, 称为局域同构. 局域同构的李群整体上不一定同构. 有两个典型的反例. SU(2) 群和 SO(3) 群有相同的结构常数, 它们局域同构, 但整体上是同态关系. 二维幺正矩阵群 U(2) 包含子群 SU(2), 群元素的行列式集合也构成子群 U(1), 这两个子群有公共元素 $\pm\mathbf{1}$, 因而不是直乘关系. U(2) 群不同构于 SU(2)⊗ U(1) 群, 但它们局域同构.

四、李群的伴随表示

在式 (4.26) 中, 我们定义了李群的伴随表示

$$D(R)I_jD(R)^{-1}=\sum_k I_kD^{\rm ad}_{kj}(R) \tag{4.116}$$

它是 g 维表示, 描写生成元在共轭变换中的变换性质. 现在我们来进一步研究李群伴随表示的性质.

把式 (4.116) 中的 R 取为无穷小元素, 并用生成元的定义式 (4.24) 代入

$$D(R)=\mathbf{1}-{\rm i}\sum_\ell r_\ell I_\ell\ ,\qquad D(R)^{-1}=\mathbf{1}+{\rm i}\sum_\ell r_\ell I_\ell,$$

$$D^{\rm ad}_{kj}(R)=\delta_{kj}-{\rm i}\sum_\ell r_\ell\left(I^{\rm ad}_\ell\right)_{kj},$$

$${\rm i}\sum_k C_{\ell j}{}^kI_k=[I_\ell,\ I_j]=\sum_k I_k\left(I^{\rm ad}_\ell\right)_{kj} \tag{4.117}$$

比较可知, $D^{\rm ad}(R)$ 的生成元与李群的结构常数直接相关

$$\left(I^{\rm ad}_j\right)_{k\ell}={\rm i}C_{j\ell}{}^k \tag{4.118}$$

利用李氏第三定理, 容易证明这组矩阵确实满足对易关系式 (4.107)

$$\begin{aligned}\left[I^{\rm ad}_j,\ I^{\rm ad}_k\right]_{rs}&=\sum_p\left\{\left(I^{\rm ad}_j\right)_{rp}\left(I^{\rm ad}_k\right)_{ps}-\left(I^{\rm ad}_k\right)_{rp}\left(I^{\rm ad}_j\right)_{ps}\right\}\\&=-\sum_p\left\{C_{jp}{}^rC_{ks}{}^p-C_{kp}{}^rC_{js}{}^p\right\}\\&=-\sum_p\left\{C_{jp}{}^rC_{ks}{}^p+C_{kp}{}^rC_{sj}{}^p\right\}\\&=\sum_p C_{sp}{}^rC_{jk}{}^p=i\sum_p C_{jk}{}^p\left(I^{\rm ad}_p\right)_{rs}\end{aligned}$$

通常伴随表示既不是由式 (4.26) 通过微商来计算, 也不是由式 (4.118) 的生成元, 通过解微分方程 (4.99) 来计算, 而是把已知的表示生成元和式 (4.118) 比较, 确定哪个表示是伴随表示. 式 (4.116) 和 (4.118) 是伴随表示的基本性质, 伴随表示的许多应用来自这两个式子.

SU(2) 群和 SO(3) 群有共同的结构常数, 因而有共同的伴随表示

$$\left(I^{\rm ad}_a\right)_{bd}={\rm i}C_{ad}{}^b=-{\rm i}\epsilon_{abd}=\left(T_a\right)_{bd} \tag{4.119}$$

这个伴随表示就是 SO(3) 群的自身表示. 事实上, 比较式 (4.41) 和 (4.26), 就可知道这结论.

由于 SO(3) 群的微量微分算符是轨道角动量算符, 把式 (4.116) 写成标量函数变换算符 P_R 的形式时, 有

$$P_R L_a P_R^{-1} = \sum_{b=1}^{3} L_b R_{ba} \tag{4.120}$$

特别是当 $a=3$, $R=R(\varphi,\theta,0)=S(\varphi,\theta)$ 时, R_{b3} 正是单位矢量 $\hat{\boldsymbol{n}}(\theta,\varphi)$ 的分量, 上式给出了轨道角动量算符在任意 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向分量的表达式

$$\vec{L}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}(\theta,\varphi) = P_R L_3 P_R^{-1}, \qquad R=R(\varphi,\theta,0) \tag{4.121}$$

因为绕 x_3 轴转动 γ 角的变换可与 L_3 对易, 所以上式中的 R 也可取成 $R(\varphi,\theta,\gamma)$, 但取 $\gamma=0$ 较方便. 如果 $\psi_m^\ell(x)$ 是属于 SO(3) 群不可约表示 D^ℓ m 行的函数, 它是 L_3 的本征函数, 则 $P_R\psi_m^\ell(x)$ 就是 $\vec{L}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}$ 的本征函数, 本征值是 m, 其中 $R=R(\varphi,\theta,\gamma)$. 当然它们都是 L^2 的本征函数, 本征值是 $\ell(\ell+1)$. 这就是 $P_R\psi_m^\ell(x)$ 的物理意义.

对于给定的李群, 当参数选定以后, 结构常数也就完全确定了. 但如果重新选择参数, 那么结构常数就要跟着变化. 现在我们来证明, 对紧致李群, 一定可以选择到适当的实参数, 使实的结构常数对三个指标完全反对称, 于是伴随表示的生成元是纯虚的反对称矩阵, 伴随表示是实正交表示. 这是紧致李群的特征.

选择李群的另一组参数 $\overline{\alpha}_j$

$$\overline{\alpha}_j = \sum_p \alpha_p \left(X^{-1}\right)_{pj} \tag{4.122}$$

生成元随参数做相应的组合, 以保持表示矩阵不变, $\sum_j \alpha_j I_j = \sum_j \overline{\alpha}_j \overline{I}_j$,

$$\overline{I}_j = \sum_q X_{jq} I_q \tag{4.123}$$

对新的参数, 由生成元的对易关系可以确定新的结构常数 $\overline{C}_{jk}{}^{\ell}$

$$\begin{aligned}
\left[\overline{I}_j,\ \overline{I}_k\right] &= \sum_{pq} X_{jp}X_{kq}\left[I_p,\ I_q\right] \\
&= \sum_{pq} X_{jp}X_{kq}\left\{\mathrm{i}\sum_s C_{pq}{}^{s} I_s\right\} \\
&= \mathrm{i}\sum_{\ell}\left\{\sum_{pqs} X_{jp}X_{kq}C_{pq}{}^{s}\left(X^{-1}\right)_{s\ell}\right\}\overline{I}_\ell,
\end{aligned}$$

$$\overline{C}_{jk}{}^{\ell} = \sum_{pqs} X_{jp}X_{kq}C_{pq}{}^{s}\left(X^{-1}\right)_{s\ell} \tag{4.124}$$

我们要找组合矩阵 X, 使新的结构常数 $\overline{C}_{jk}{}^{\ell}$ 不仅对 jk 指标反对称, 而且对 $k\ell$ 指标也反对称.

为此目的, 我们从另一角度考虑问题. 在原参数下, 伴随表示的生成元是纯虚数, 伴随表示是实表示. 对紧致李群, 实表示可通过实相似变换 Y^T 化为实正交表示, 从而把生成元 $I_j^{\rm ad}$ 化为纯虚的反对称矩阵 I_j'

$$I_j' = \left(Y^T\right)^{-1} I_j^{\rm ad} Y^T\ , \qquad \left(I_j'\right)_{\ell k} = -\left(I_j'\right)_{k\ell}$$

$$\left(I_j'\right)_{\ell k} = \sum_{pq}\ \left(Y^{-1}\right)_{p\ell}\left(I_j\right)_{pq} Y_{kq} = {\rm i}\sum_{pq}\ Y_{kq} C_{jq}{}^{p}\left(Y^{-1}\right)_{p\ell} = {\rm i}\sum_{r}\ \left(Y^{-1}\right)_{jr}\left(C'\right)_{rk}{}^{\ell}$$

因而新的结构常数 $(C')_{rk}{}^{\ell}$ 对于三个指标是完全反对称的

$$\left(C'\right)_{rk}{}^{\ell} = \sum_{spq}\ Y_{rs} Y_{kp} C_{sp}{}^{q}\left(Y^{-1}\right)_{q\ell} = -\left(C'\right)_{kr}{}^{\ell} = -\left(C'\right)_{r\ell}{}^{k} \tag{4.125}$$

比较式 (4.124) 和 (4.125) 可见, 如果取 $X = Y$, 则 $\overline{C}_{jk}{}^{\ell} = (C')_{jk}{}^{\ell}$. 也就是说, 对紧致李群, 我们可以把实参数做组合 Y, 使结构常数对三个指标完全反对称. 对物理上常用的紧致李群, 已经选定参数, 使结构常数对三个指标完全反对称. 例如, SO(3) 群和 SU(2) 群采用参数 $\vec{\omega}$, 结构常数为 ϵ_{abc}.

五、李代数

在表示矩阵按生成元展开的式 (4.24) 中, 我们引入了系数 $-{\rm i}$, 使幺正表示的生成元是厄米矩阵, 其代价是在生成元的对易关系式 (4.107) 中出现系数 i, 在数学文献中, 通常取 $-{\rm i}I_j$ 作为生成元, 则

$$\left[\left(-{\rm i}I_j\right),\ \left(-{\rm i}I_k\right)\right] = \sum_{\ell}\ C_{jk}{}^{\ell}\left(-{\rm i}I_\ell\right) \tag{4.126}$$

在李群的真实表示中, $(-{\rm i}I_j)$ 是线性无关的, 以它们作为基构成的实线性空间, 以对易关系式 (4.126) 作为矢量乘积的定义, 则此实线性空间对此矢量乘积是封闭的, 构成代数, 称为实李代数. 紧致李群的实李代数称为紧致实李代数. 生成元的所有复线性组合构成的线性空间关于此乘积当然也是封闭的, 构成的代数称为复李代数, 简称李代数. 复李代数称为相应的实李代数的复化, 实李代数称为复李代数的实形. 不同实李代数的复化可能相同. 有两对比较简单的例子: SO(3) 群和 SO(2, 1) 群, SO(4) 和洛伦兹群. 在每一对群中, 前者是紧致李群, 后者是非紧致李群, 它们的实李代数不同, 但复李代数相同. 人们正是利用这一性质寻找 SO(2, 1) 群和洛伦兹群的不等价不可约表示的. 我们将在第九章讨论洛伦兹群的不等价不可约表示. 它们的幺正不可约表示, 前者只有有限维, 后者除恒等表示外只有无限维的. 在"群论习题精解"[64] 第四章第 24 题讨论了 SO(2, 1) 群的无限维幺正不可约表示.

设李群 G 有子李群 H, 它们的李代数分别记作 $\mathcal{L}_G$ 和 $\mathcal{L}_H \subset \mathcal{L}_G$. 若对任意的 $X \in \mathcal{L}_G, Y \in \mathcal{L}_H$, 必有 $[X,\ Y] \in \mathcal{L}_H$, 则称 $\mathcal{L}_H$ 是 $\mathcal{L}_G$ 的理想. 零和全体是李代数的两个平庸的理想. 如果理想中的任意矢量乘积可以对易, 则称阿贝尔理想. 李代数存在非平庸理想是李群存在非平庸不变子李群的充要条件. 附录 12 将简要解释这一结论.

不存在非平庸不变子李群的李群称为单纯李群, 不存在非平庸理想的李代数称为单纯李代数. 不存在阿贝尔不变子李群的李群称为半单李群, 除了零空间外不存在阿贝尔理想的李代数称为半单李代数. 一阶李群没有非平庸子李群, 因而必为单纯李群, 但它是阿贝尔李群, 不是半单李群. 相应的李代数也是阿贝尔的单纯李代数, 不是半单李代数. 高于一阶的单纯李群都是半单李群, 相应的单纯李代数也是半单李代数. 从伴随表示的定义式 (4.116) 就可知道, 李群是单纯李群, 即李代数是单纯李代数的充要条件是, 李群的伴随表示是不可约表示. SU(2) 群和 SO(3) 群的伴随表示是不可约表示, 因而它们都是单纯李群.

对紧致李群, 可选参数使结构常数完全反对称, 则可证明生成元的平方和可与每一生成元对易

$$
\begin{aligned}
\sum_j \ [I_j I_j,\ I_k] &= \sum_j \ \{I_j\,[I_j,\ I_k] + [I_j,\ I_k]\,I_j\} \\
&= \mathrm{i}\sum_{j\ell} \ \left\{I_j C_{jk}{}^{\ell} I_\ell + C_{jk}{}^{\ell} I_\ell I_j\right\} = 0
\end{aligned} \tag{4.127}
$$

因此它在不可约表示中取常数矩阵, 此常数可用来标记李群的不可约表示. 由生成元的 n 次齐次多项式构成, 可与所有生成元对易的算符称为 n 阶卡西米尔 (Casimir) 算子, 它在不可约表示中所取的常数称为 n 阶卡西米尔不变量. 紧致李群生成元的平方和是二阶卡西米尔算子

$$
\sum_j \ I_j^\lambda I_j^\lambda = C_2(\lambda)\mathbf{1} \tag{4.128}
$$

其中, I_j^λ 是不可约表示 D^λ 的生成元, $C_2(\lambda)$ 是在此表示中的二阶卡西米尔不变量. 因为二阶卡西米尔算子和不变量最常用, 所以常常把二阶两字省略.

为了计算 $C_2(\lambda)$, 需要知道每一个生成元的具体形式, 对参数较多的李群, 这个计算比较复杂. 下面介绍计算二阶卡西米尔不变量的另一方法. 如果紧致李群又是单纯的, 则伴随表示是不可约表示. 引入 $g \times g$ 矩阵 $T_{jk} = \mathrm{Tr}(I_j^\lambda I_k^\lambda)$, 可以证明它与伴随表示的每个生成元 I_p^{ad} 都对易

$$
\begin{aligned}
\left[I_p^{\mathrm{ad}},\ T\right]_{jk} &= \sum_q \ \left\{\left(I_p^{\mathrm{ad}}\right)_{jq} \mathrm{Tr}\left(I_q^\lambda I_k^\lambda\right) - \mathrm{Tr}\left(I_j^\lambda I_q^\lambda\right)\left(I_p^{\mathrm{ad}}\right)_{qk}\right\} \\
&= \mathrm{i}\sum_q \ \left\{-C_{pj}{}^{q}\mathrm{Tr}\left(I_q^\lambda I_k^\lambda\right) - C_{pk}{}^{q}\mathrm{Tr}\left(I_j^\lambda I_q^\lambda\right)\right\}
\end{aligned}
$$

$$= -\mathrm{Tr}\left\{\left(I_p^\lambda I_j^\lambda - I_j^\lambda I_p^\lambda\right) I_k^\lambda + I_j^\lambda \left(I_p^\lambda I_k^\lambda - I_k^\lambda I_p^\lambda\right)\right\} = 0$$

因此它是常数矩阵

$$\mathrm{Tr}\left(I_j^\lambda I_k^\lambda\right) = \delta_{jk} T_2(\lambda) \tag{4.129}$$

只要知道表示中一个生成元的具体形式, 就可算出 $T_2(\lambda)$. 式 (4.129) 中, 取 $j = k$, 并对 j 求和, 正好等于式 (4.128) 取迹

$$g T_2(\lambda) = m_\lambda C_2(\lambda) \tag{4.130}$$

其中, m_λ 是不可约表示 D^λ 的维数. 这样, 可由 $T_2(\lambda)$ 计算出 $C_2(\lambda)$. 因为 $T_2(\lambda)$ 和 $C_2(\lambda)$ 只差一个常系数, 有时把 $T_2(\lambda)$ 也叫做二阶卡西米尔不变量.

SO(3) 群的二阶卡西米尔算子就是轨道角动量平方算符, 卡西米尔不变量 $C_2(\lambda)$ 为 $\ell(\ell+1)$[见式 (4.88)]. 若按式 (4.130) 计算, 则得

$$\begin{aligned} T_2(j) &= \sum_m \left(I_3^\ell\right)^2_{mm} = 2\sum_{m=1}^{\ell} m^2 = \ell(\ell+1)(2\ell+1)/3, \\ C_2(j) &= 3T_2(j)/(2\ell+1) = \ell(\ell+1) \end{aligned} \tag{4.131}$$

结果与式 (4.88) 相同.

4.6 克莱布施–戈登系数

一、直乘表示的约化

现在来讨论 SU(2) 群 [或 SO(3) 群] 两不可约表示直乘分解的克莱布施 – 戈登级数和克莱布施 – 戈登系数. 属 SO(3) 群不可约表示 D^ℓ m 行的函数 $\psi_m^\ell(x)$ 是轨道角动量的本征函数. 两个子系统合成复合系统, 波函数是子系统波函数的乘积. 如果子系统处于有确定角动量的状态, 则复合系统波函数按 SO(3) 群两不可约表示的直乘表示变化, 总角动量的可能取值与直乘表示约化的克莱布施 – 戈登级数有关, 因而 SO(3) 群的克莱布施 – 戈登系数也称为矢量耦合系数.

设相似变换 C^{jk} 把 SU(2) 群的两不可约表示的直乘表示约化

$$\begin{aligned} &\left(C^{jk}\right)^{-1}\left\{D^j(u)\times D^k(u)\right\} C^{jk} = \bigoplus_J a_J D^J(u), \\ &\chi^j(\omega)\chi^k(\omega) = \sum_J a_J \chi^J(\omega) \end{aligned} \tag{4.132}$$

a_J 可按特征标公式 (4.53) 计算, 也可以把 SU(2) 群不可约表示的特征标值公式 (4.76) 代入上式直接计算. 不失普遍性, 假设 $j \geqslant k$, 得

$$\chi^j(\omega) = \sum_{\mu=-j}^{j} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu\omega} = \sum_{\mu=-j}^{j} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu\omega} = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(j+1)\omega} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}j\omega}}{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega} - 1},$$

$$\chi^j(\omega)\chi^k(\omega) = \sum_{\mu=-k}^{k} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(j+\mu+1)\omega} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(j+\mu)\omega}}{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega}-1} = \sum_{J=j-k}^{j+k} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(J+1)\omega} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}J\omega}}{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega}-1} = \sum_{J=j-k}^{j+k} \chi^J(\omega) \tag{4.133}$$

当 $j < k$ 时, $j-k$ 换成 $k-j$. 一般地有

$$a_J = \begin{cases} 1, & \text{当 } J = j+k,\ j+k-1,\ \cdots,\ |j-k| \\ 0, & \text{其他} \end{cases} \tag{4.134}$$

将式 (4.134) 代入式 (4.132), 得到的不可约表示直和就是 SU(2) 群 [或 SO(3) 群] 的克莱布施 – 戈登级数. 两个角动量为 j 和 k 的子系统耦合成复合系统时, 总角动量 J 可取式 (4.134) 给出的 $2k+1$(当 $j \geqslant k$ 时) 或 $2j+1$(当 $j \leqslant k$ 时) 个数值, 而且每个值都只出现一次. 在量子力学中这规则称为角动量的矢量相加规则. 因为在 j, k 和 J 三个数值中, 任何一个不大于另两个之和, 不小于另两个之差, 就像三角形的三条边长满足的关系, 因而这规则也称为三角形规则, 记作 $\Delta(j,k,J)$. 当然这里三个指标都只能取整数或半奇数.

相似变换矩阵 C^{jk} 与 j 和 k 有关, 它的行指标用 $\mu\nu$ 标记, 列指标用 JM 标记, 矩阵元素称为克莱布施 – 戈登系数, 简称 CG 系数. 标记这系数的符号在文献中很不统一, 但无论哪种记法都必须显示这六个指标. 本书采用矩阵元素的形式, 记作 $C^{jk}_{\mu\nu JM}$, 常见的还有类似狄拉克符号的形式, 记作 $\langle jk\mu\nu|jkJM\rangle$, 或 $\langle j\mu, k\nu|JM\rangle$.

把式 (4.132) 写成生成元的形式. 注意生成元是由表示矩阵的微商来计算的, 因而直乘表示的生成元为

$$I_a^j \times \mathbf{1}_{2k+1} + \mathbf{1}_{2j+1} \times I_a^k \tag{4.135}$$

代入式 (4.132) 得

$$\sum_{\rho} \left(I_a^j\right)_{\mu\rho} C^{jk}_{\rho\nu JM} + \sum_{\lambda} \left(I_a^k\right)_{\nu\lambda} C^{jk}_{\mu\lambda JM} = \sum_{N} C^{jk}_{\mu\nu JN} \left(I_a^J\right)_{NM} \tag{4.136}$$

取 $a=3$, 因生成元 I_3 是对角矩阵, 代入得

$$(\mu+\nu) C^{jk}_{\mu\nu JM} = M C^{jk}_{\mu\nu JM}$$

即

$$C^{jk}_{\mu\nu JM} = 0\,, \qquad \text{当 } M \neq \mu+\nu \tag{4.137}$$

这反映了在两角动量作矢量求和时, 角动量沿 x_3 轴的分量按标量相加.

用 $I_\pm = I_1 \pm \mathrm{i}I_2$ 代替式 (4.136) 中的 I_a, 并以式 (4.80) 的矩阵形式代入得

$$\Gamma^j_{\pm\mu} C^{jk}_{(\mu\mp1)\nu JM} + \Gamma^k_{\pm\nu} C^{jk}_{\mu(\nu\mp1)JM} = C^{jk}_{\mu\nu J(M\pm1)} \Gamma^J_{\mp M} \tag{4.138}$$

此式包含两个公式, 称为 CG 系数的递推关系, 由它们可计算 CG 系数.

SU(2) 群是紧致李群, 我们只需讨论它的幺正表示和幺正的相似变换, 即 C^{jk} 是幺正矩阵. 在 3.7 节我们已指出, 约化可约表示的相似变换矩阵还有一定的不确定性. 具体到 SU(2) 群, 虽然克莱布施－戈登级数中没有重表示, 有相同 J 的 CG 系数还允许乘一个公共的相因子. 我们希望选择此相因子, 使 C^{jk} 变成实正交矩阵. 做法如下：对 CG 级数中每一个表示 D^J, 选择相因子使系数 $C^{jk}_{j(-k)J(j-k)}$ 是正实数. 在式 (4.138) 中取下面的符号, 并令 $\mu=j$, 则等式左面第一项为零, 余下两项的系数都是正实数. 依次取 ν 等于 $-k, -k+1, \cdots, k-1$, 可证所有 $C^{jk}_{j\nu J(j+\nu)}$ 都是正实数. 同理取式 (4.138) 上面的符号, 并令 $\nu=-k$, 等式左面第二项为零, 可证所有 $C^{jk}_{\mu(-k)J(\mu-k)}$ 也都是正实数. 再考虑到递推关系式 (4.138) 系数都是实数, 可知在上述相位规定下, 所有 CG 系数都是实数, C^{jk} 矩阵是实正交矩阵

$$\begin{aligned}
&\sum_{\mu\nu} C^{jk}_{\mu\nu JM} C^{jk}_{\mu\nu J'M'} = \delta_{JJ'}\delta_{MM'} \\
&\sum_{JM} C^{jk}_{\mu\nu JM} C^{jk}_{\mu'\nu' JM} = \delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'}
\end{aligned} \tag{4.139}$$

由于式 (4.137), 上式中的求和指标其实只有一个是独立的, 因而可写为

$$\begin{aligned}
&\sum_{\mu} C^{jk}_{\mu(M-\mu)JM} C^{jk}_{\mu(M-\mu)J'M} = \delta_{JJ'} \\
&\sum_{J} C^{jk}_{\mu(M-\mu)JM} C^{jk}_{\mu'(M-\mu')JM} = \delta_{\mu\mu'}
\end{aligned} \tag{4.140}$$

二、转动群的克莱布施–戈登系数

SU(2) 群的克莱布施－戈登系数主要有两种计算方法. 一种是由递推关系式 (4.138) 计算, 另一种直接由相似变换关系式 (4.132) 通过群上的积分来计算. 计算的主要步骤请参看附录 13. 计算中用到的组合数求和公式也在那里做了介绍. 常用的克莱布施－戈登系数有三种形式, 一种是拉卡 (Racah) 形式, 一种是范德瓦登 (Van der Waerden) 形式, 一种是维格纳 (Wigner) 形式. 这些形式互相是等价的, 它们可通过求和指标的替换互相变换. 这里只给出较对称的范德瓦登形式

$$\begin{aligned}
C^{jk}_{\mu(M-\mu)JM} = &\ (2J+1)^{1/2}\Delta(j,k,J)\{(j+\mu)!(j-\mu)! \\
&\times (k+M-\mu)!(k-M+\mu)!(J+M)!(J-M)!\}^{1/2} \\
&\times \sum_n (-1)^n \ \{(n)!(J-j-M+\mu+n)!(J-k+\mu+n)! \\
&\times (j-\mu-n)!(k+M-\mu-n)!(j+k-J-n)!\}^{-1},
\end{aligned} \tag{4.141}$$

$$n\ 取\quad \max\left\{\begin{matrix} 0 \\ j+M-\mu-J \\ k-\mu-J \end{matrix}\right\}, \cdots, \min\left\{\begin{matrix} j-\mu \\ k+M-\mu \\ j+k-J \end{matrix}\right\}$$

其中, $|\mu| \leqslant j$, $|M-\mu| \leqslant k$, $|M| \leqslant J$, $|j-k| \leqslant J \leqslant j+k$ 和

$$\Delta(a,b,c) = \left\{\frac{(a+b-c)!(b+c-a)!(c+a-b)!}{(a+b+c+1)!}\right\}^{1/2} \tag{4.142}$$

式中包含的因子 $\Delta(j,k,J)$ 清楚地显示了角动量量子数必须满足的三角形条件. 由式 (4.141) 容易推出克莱布施 – 戈登系数的下列对称性质

$$\begin{aligned}
C^{jk}_{\mu\nu JM} &= C^{kj}_{(-\nu)(-\mu)J(-M)} = (-1)^{j+k-J}\ C^{kj}_{\nu\mu JM} \\
&= (-1)^{j+k-J}\ C^{jk}_{(-\mu)(-\nu)J(-M)} \\
&= (-1)^{k-J-\mu}\ \left(\frac{2J+1}{2k+1}\right)^{1/2}\ C^{Jj}_{(-M)\mu k(-\nu)} \\
&= (-1)^{j-J+\nu}\ \left(\frac{2J+1}{2j+1}\right)^{1/2}\ C^{kJ}_{\nu(-M)j(-\mu)}
\end{aligned} \tag{4.143}$$

其中, $M=\mu+\nu$. 第一个等式是显然的, 第二个等式由求和指标替换 $n'=j+k-J-n$ 得到, 第四个等式由求和指标替换 $n'=k-J-\mu+n$ 得到, 第三和第五个等式可由其他等式推得.

维格纳 (Wigner) 引入更对称的 $3j$ 符号

$$\begin{aligned}
&\begin{pmatrix} j & k & \ell \\ \mu & \nu & \rho \end{pmatrix} = (-1)^{j-k-\rho}(2\ell+1)^{-1/2} C^{jk}_{\mu\nu\ell(-\rho)}, \\
&|j-k| \leqslant \ell \leqslant j+k, \qquad \mu+\nu+\rho=0
\end{aligned} \tag{4.144}$$

$3j$ 符号满足如下对称性质和正交关系

$$(-1)^{j+k+\ell}\begin{pmatrix} j & k & \ell \\ \mu & \nu & \rho \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k & j & \ell \\ \nu & \mu & \rho \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j & \ell & k \\ \mu & \rho & \nu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j & k & \ell \\ -\mu & -\nu & -\rho \end{pmatrix} \tag{4.145}$$

$$\begin{aligned}
&\sum_{\ell\rho} (2\ell+1) \begin{pmatrix} j & k & \ell \\ \mu & \nu & \rho \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & k & \ell \\ \mu' & \nu' & \rho \end{pmatrix} = \delta_{\mu\mu'}\ \delta_{\nu\nu'}, \\
&\sum_{\mu\nu} \begin{pmatrix} j & k & \ell \\ \mu & \nu & \rho \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & k & \ell' \\ \mu & \nu & \rho' \end{pmatrix} = (2\ell+1)^{-1}\ \delta_{\ell\ell'}\ \delta_{\rho\rho'}
\end{aligned} \tag{4.146}$$

对于任意两列交换, 或第二行全部反号, $3j$ 符号只改变一个因子 $(-1)^{j+k+\ell}$.

最后, 我们再次强调, 克莱布施 – 戈登矩阵是约化直乘表示的相似变换矩阵, 克

莱布施 - 戈登系数把按直乘表示变化的乘积波函数组合成总角动量的本征函数

$$
\begin{aligned}
P_R\psi^j_\mu(x^{(1)}) &= \sum_\rho \ \psi^j_\rho(x^{(1)})D^j_{\rho\mu}(R), \\
P_R\psi^k_\nu(x^{(2)}) &= \sum_\lambda \ \psi^k_\lambda(x^{(2)})D^k_{\lambda\nu}(R), \\
\Psi^J_M(x^{(1)},x^{(2)}) &= \sum_\mu \ \psi^j_\mu(x^{(1)})\psi^k_{M-\mu}(x^{(2)})C^{jk}_{\mu(M-\mu)JM}, \\
\psi^j_\mu(x^{(1)})\psi^k_\nu(x^{(2)}) &= \sum_J \ \Psi^J_{\mu+\nu}(x^{(1)},x^{(2)})C^{jk}_{\mu\nu J(\mu+\nu)}, \\
P_R\Psi^J_M(x^{(1)},x^{(2)}) &= \sum_N \ \Psi^J_N(x^{(1)},x^{(2)})D^J_{NM}(R)
\end{aligned} \tag{4.147}
$$

像 SU(2) 群和 SO(3) 群那样, 能把克莱布施 - 戈登系数用解析形式表达出来的情况是不多的. 即使如此, 在实际应用时, 用解析表达式来计算克莱布施 - 戈登系数仍嫌太麻烦. 近来已有现成的软件通过计算机来计算. 对角动量比较小的情况, 还是常用列表法, 或用展开式 (4.147) 的方法, 来表达克莱布施 - 戈登系数. SU(2) 群的克莱布施 - 戈登系数有专用表. 列表时常利用 CG 系数的对称性质 (4.143) 来减少列表量. 附录 13 列出了 $k=1/2$ 和 $k=1$ 和某些特殊 J 值的克莱布施 - 戈登系数.

* 三、简单应用

1. 两个粒子系统空间波函数的置换对称性

两个粒子系统总角动量的确定状态为

$$
\Psi^L_M(1,2) = \sum_{m_1m_2} \ C^{\ell_1\ell_2}_{m_1m_2LM}\psi^{\ell_1}_{m_1}(1)\psi^{\ell_2}_{m_2}(2)
$$

当两个粒子发生置换时, 有

$$
\Psi^L_M(2,1) = \sum_{m_1m_2} \ C^{\ell_1\ell_2}_{m_1m_2LM}\psi^{\ell_1}_{m_1}(2)\psi^{\ell_2}_{m_2}(1) = \sum_{m_2m_1} \ (-1)^{L-\ell_1-\ell_2}C^{\ell_2\ell_1}_{m_2m_1LM}\psi^{\ell_2}_{m_2}(1)\psi^{\ell_1}_{m_1}(2)
$$

若 $\ell_1=\ell_2=\ell$, 则

$$
\Psi^L_M(2,1) = (-1)^{L-2\ell}\Psi^L_M(1,2) \tag{4.148}
$$

例如, 两个 P 波 ($\ell=1$) 电子构成的系统的空间波函数, 总角动量 $L=2$ 和 0 的态对于置换是对称的, $L=1$ 的态是反对称的.

2. 勒让德函数的展开

两个相同 ℓ 的球函数可组成在转动中不变的函数 ($L=0$)

$$\begin{aligned}\Phi_0^0(\hat{\boldsymbol{n}}_1,\hat{\boldsymbol{n}}_2)&=\sum_m C_{-mm00}^{\ell\ell}\mathrm{Y}_{-m}^{\ell}(\hat{\boldsymbol{n}}_1)\mathrm{Y}_m^{\ell}(\hat{\boldsymbol{n}}_2)\\&=\sum_m \frac{(-1)^{\ell+m}}{(2\ell+1)^{1/2}}\mathrm{Y}_{-m}^{\ell}(\hat{\boldsymbol{n}}_1)\mathrm{Y}_m^{\ell}(\hat{\boldsymbol{n}}_2)\end{aligned}$$

做转动 R, 把 $\hat{\boldsymbol{n}}_1$ 转到 x_3 轴方向, $\hat{\boldsymbol{n}}_2$ 转到 x_1x_3 平面内的正 x_1 一侧. 记 $\hat{\boldsymbol{n}}_1$ 和 $\hat{\boldsymbol{n}}_2$ 的夹角为 θ, 则因

$$\begin{aligned}&\mathrm{Y}_{-m}^{\ell}(\vec{e}_3)=\mathrm{Y}_{-m}^{\ell}(0,0)=\delta_{m0}\left(\frac{2\ell+1}{4\pi}\right)^{1/2},\\&\mathrm{Y}_0^{\ell}(\theta,0)=\left(\frac{2\ell+1}{4\pi}\right)^{1/2}\mathrm{P}_\ell(\cos\theta),\\&\mathrm{Y}_m^{\ell}(\hat{\boldsymbol{n}}_1)^*=(-1)^m\mathrm{Y}_{-m}^{\ell}(\hat{\boldsymbol{n}}_1)\end{aligned}$$

故

$$\Phi_0^0(\hat{\boldsymbol{n}}_1,\hat{\boldsymbol{n}}_2)=\frac{(-1)^{\ell}(2\ell+1)^{1/2}}{4\pi}\mathrm{P}_\ell(\cos\theta),$$

$$\begin{aligned}\mathrm{P}_\ell(\hat{\boldsymbol{n}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{n}}_2)=\mathrm{P}_\ell(\cos\theta)&=\frac{4\pi}{2\ell+1}\sum_m(-1)^m\mathrm{Y}_{-m}^{\ell}(\hat{\boldsymbol{n}}_1)\mathrm{Y}_m^{\ell}(\hat{\boldsymbol{n}}_2)\\&=\frac{4\pi}{2\ell+1}\sum_m\mathrm{Y}_m^{\ell}(\hat{\boldsymbol{n}}_1)^*\mathrm{Y}_m^{\ell}(\hat{\boldsymbol{n}}_2)\end{aligned}\tag{4.149}$$

量子力学分波法中, 根据平面波是达朗贝尔 (d'Alembert) 方程解, 把平面波按勒让德函数展开, 现在可把这展开式进一步写成球函数的形式

$$\begin{aligned}\exp\left(\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}\right)=\exp\left(\mathrm{i}kr\cos\theta\right)&=\sum_{\ell=0}^{\infty}\mathrm{i}^{\ell}(2\ell+1)\mathrm{j}_\ell(kr)\mathrm{P}_\ell(\cos\theta)\\&=4\pi\sum_{\ell=0}^{\infty}\mathrm{i}^{\ell}\mathrm{j}_\ell(kr)\sum_{m=-\ell}^{\ell}\mathrm{Y}_m^{\ell}(\hat{\boldsymbol{k}})^*\mathrm{Y}_m^{\ell}(\hat{\boldsymbol{r}})\end{aligned}\tag{4.150}$$

其中, j_ℓ 是球贝塞尔 (Bessel) 函数, $\hat{\boldsymbol{k}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{r}}$ 表该方向的单位矢量.

3. 球函数的乘积展开

把式 (4.132) 中的 D^ℓ 函数用球函数代入, 得

$$\mathrm{Y}_{m_1}^{\ell_1}(\hat{\boldsymbol{n}})\mathrm{Y}_{m_2}^{\ell_2}(\hat{\boldsymbol{n}})=\sum_L\left\{\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}{4\pi(2L+1)}\right\}^{1/2}C_{00L0}^{\ell_1\ell_2}C_{m_1m_2L(m_1+m_2)}^{\ell_1\ell_2}\mathrm{Y}_{m_1+m_2}^{L}(\hat{\boldsymbol{n}})\tag{4.151}$$

因子 $C^{\ell_1\ell_2}_{00L0}$ 保证了等式两边波函数的宇称相等. 利用 CG 系数的正交关系式 (4.139) 和球函数的正交关系式 (4.94), 得

$$C^{\ell_1\ell_2}_{00L0}\mathrm{Y}^L_M(\hat{\boldsymbol{n}}) = \left\{\frac{4\pi(2L+1)}{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}\right\}^{1/2}\sum_m C^{\ell_1\ell_2}_{m(M-m)LM}\mathrm{Y}^{\ell_1}_m(\hat{\boldsymbol{n}})\mathrm{Y}^{\ell_2}_{M-m}(\hat{\boldsymbol{n}}) \tag{4.152}$$

$$\int \mathrm{Y}^L_M(\theta,\varphi)^*\mathrm{Y}^{\ell_1}_{m_1}(\theta,\varphi)\mathrm{Y}^{\ell_2}_{m_2}(\theta,\varphi)\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi = \left\{\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}{4\pi(2L+1)}\right\}^{1/2}C^{\ell_1\ell_2}_{00L0}C^{\ell_1\ell_2}_{m_1m_2LM} \tag{4.153}$$

四、三个角动量状态的叠加问题

三个处于确定角动量状态的系统组合成复合系统, 波函数通过适当组合, 可以得到有确定总角动量的状态. 组合的方法是, 先把两个子系统波函数组合, 然后再与第三个子系统波函数组合. 从群论角度看, 这是三个不可约表示直乘分解的问题, 在分解中不可约表示的重数有可能高于 1, 因而组合方式与组合的次序有关. 例如

$$\begin{aligned} D^1\times D^1\times D^1 &\simeq \left\{D^2\oplus D^1\oplus D^0\right\}\times D^1 \\ &\simeq \left\{D^3\oplus D^2\oplus D^1\right\}\oplus\left\{D^2\oplus D^1\oplus D^0\right\}\oplus D^1 \\ &\simeq D^3\oplus 2D^2\oplus 3D^1\oplus D^0 \end{aligned}$$

属同一个不可约表示的几个函数空间, 它们的对应函数基做相同的任意线性组合 (即组合方式不依赖于磁量子数) 后, 仍属同一个表示. 也就是说, 有重表示的情况, 基的选择有更大不确定性, 允许做不依赖于磁量子数 (即表示的行数) 的任意线性组合.

设第一个方式是先把子系统 1 和 2 的角动量组合成角动量 J_{12}, 然后与第三个子系统角动量组合成总角动量 J, 第二个方式是先把子系统 2 和 3 的角动量组合成角动量 J_{23}, 然后第一个子系统角动量与它组合成总角动量 J

$$\begin{aligned} \Psi^J_M(J_{12}) &= \sum_\rho C^{J_{12}\ell}_{(M-\rho)\rho JM}\left\{\sum_{\mu\nu} C^{jk}_{\mu\nu J_{12}(M-\rho)}\psi^j_\mu(1)\psi^k_\nu(2)\right\}\psi^\ell_\rho(3), \\ \Psi^J_M(J_{23}) &= \sum_\mu C^{jJ_{23}}_{\mu(M-\mu)JM}\psi^j_\mu(1)\left\{\sum_{\nu\rho} C^{k\ell}_{\nu\rho J_{23}(M-\mu)}\psi^k_\nu(2)\psi^\ell_\rho(3)\right\} \end{aligned} \tag{4.154}$$

这两组状态间一定可以通过幺正变换 X 联系起来, 这 X 矩阵除依赖于 J, j, k 和 ℓ 外, 还依赖于 J_{12} 和 J_{23}, 但与磁量子数无关

$$\Psi^J_M(J_{23}) = \sum_{J_{12}} \Psi^J_M(J_{12})X_{J_{12}J_{23}} \tag{4.155}$$

通常为了使系数具有更大的对称性, 提出一个因子, 把 X 矩阵记成拉卡 (Racah) 系数 $W[jkJ\ell;J_{12}J_{23}]$, 或 $6j$ 符号

$$\begin{aligned} X_{J_{12}J_{23}} &= \{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)\}^{1/2}\,W[jkJ\ell;J_{12}J_{23}] \\ &= (-1)^{j+k+\ell+J}\{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)\}^{1/2}\begin{Bmatrix} j & k & J_{12} \\ \ell & J & J_{23}\end{Bmatrix} \end{aligned} \tag{4.156}$$

把式 (4.154) 代入式 (4.155), 由于函数基的线性无关性, 得

$$\begin{aligned} C^{jJ_{23}}_{\mu(M-\mu)JM}\,C^{k\ell}_{\nu\rho J_{23}(M-\mu)} &= \sum_{J_{12}} C^{J_{12}\ell}_{(M-\rho)\rho JM}\,C^{jk}_{\mu\nu J_{12}(M-\rho)} \\ &\times \{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)\}^{1/2}\,W[jkJ\ell;J_{12}J_{23}] \end{aligned} \tag{4.157}$$

利用 CG 系数的正交关系, 可把拉卡系数表成四个 CG 系数的乘积形式

$$\begin{aligned} &C^{J_{12}\ell}_{(M-\rho)\rho JM}\ \{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)\}^{1/2}\,W[jkJ\ell;J_{12}J_{23}] \\ &= \sum_{\mu\nu} C^{jJ_{23}}_{\mu(M-\mu)JM}\,C^{k\ell}_{\nu\rho J_{23}(M-\mu)}C^{jk}_{\mu\nu J_{12}(M-\rho)} \end{aligned} \tag{4.158}$$

$$\begin{aligned} &\{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)\}^{1/2}\,W[jkJ\ell;J_{12}J_{23}]\delta_{JJ'} \\ &= \sum_{\mu\nu\rho} C^{jJ_{23}}_{\mu(M-\mu)JM}\,C^{k\ell}_{\nu\rho J_{23}(M-\mu)}C^{J_{12}\ell}_{(M-\rho)\rho J'M}\,C^{jk}_{\mu\nu J_{12}(M-\rho)} \end{aligned} \tag{4.159}$$

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \end{Bmatrix} &= \sum_{\text{所有}m\ \text{和}\mu} (-1)^{\ell_1+\ell_2+\ell_3+m_1+m_2+m_3} \\ &\times \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ \mu_1 & m_2 & -m_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \ell_1 & j_2 & \ell_3 \\ -m_1 & \mu_2 & m_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & j_3 \\ m_1 & -m_2 & \mu_3 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{4.160}$$

显然, 拉卡系数和 $6j$ 系数都是实数, 因而 X 矩阵是实正交矩阵. 拉卡系数满足正交关系

$$\begin{aligned} &\sum_{J_{12}} (2J_{12}+1)W[jkJ\ell;J_{12}J_{23}]W[jkJ\ell;J_{12}J'_{23}] = \frac{\delta_{J_{23}J'_{23}}}{2J_{23}+1} \\ &\sum_{J_{23}} (2J_{23}+1)W[jkJ\ell;J_{12}J_{23}]W[jkJ\ell;J'_{12}J_{23}] = \frac{\delta_{J_{12}J'_{12}}}{2J_{12}+1} \end{aligned} \tag{4.161}$$

在附录 14, 由式 (4.159) 出发, 通过适当的求和指标替换, 具体计算了 SU(2) 群拉卡系数的解析形式

$$\begin{aligned} W[abcd;ef] = & (-1)^{a+b+c+d}\ \Delta(a,b,e)\Delta(d,e,c)\Delta(b,d,f)\Delta(a,f,c) \\ & \times \sum_z (-1)^z (z+1)!\{(z-a-b-e)!(z-c-d-e)! \\ & \times (z-b-d-f)!(z-a-c-f)!(a+b+c+d-z)! \\ & \times (a+d+e+f-z)!(b+c+e+f-z)!\}^{-1} \end{aligned} \tag{4.162}$$

$$z\text{取}\quad \max\left\{\begin{array}{c} a+b+e \\ c+d+e \\ a+c+f \\ b+d+f \end{array}\right\}, \cdots, \min\left\{\begin{array}{c} a+b+c+d \\ a+d+e+f \\ b+c+e+f \end{array}\right\}$$

其中, a, b, c, d, e 和 f 必须满足四个三角形条件, 如图 4.1 所示. 附录 14 中列出了若干拉卡系数的值.

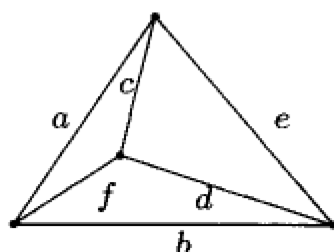
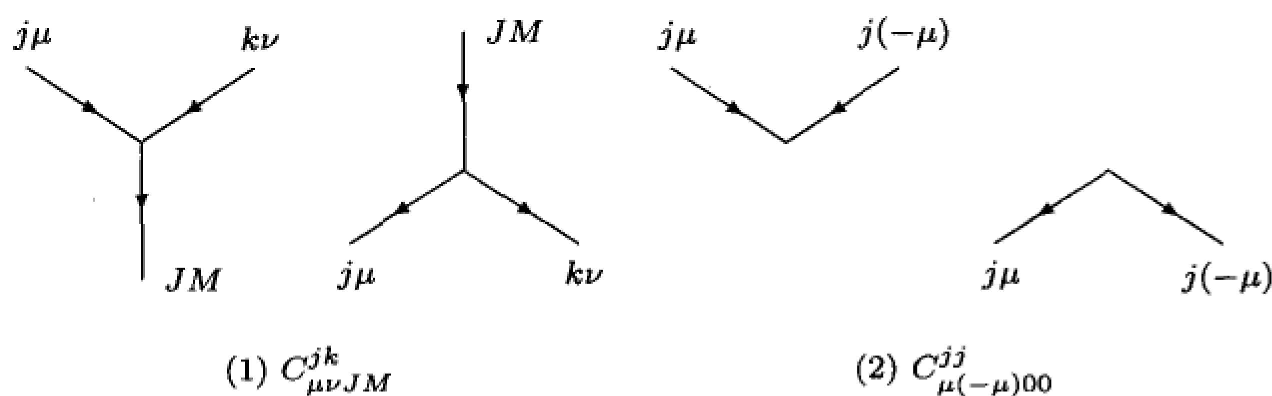


图 4.1　拉卡系数满足的四个三角形条件

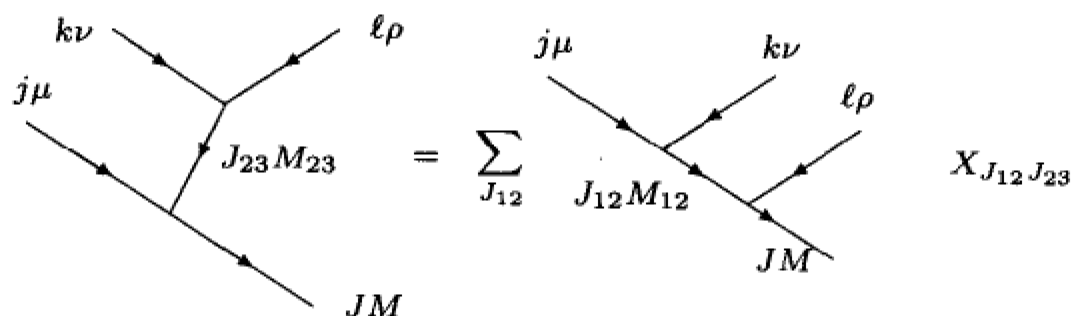
维格纳引入的 $6j$ 符号 [见式 (4.156)] 有更大的对称性. 共有 144 个相等的 $6j$ 符号

$$\begin{aligned} \left\{\begin{array}{ccc} a & b & e \\ d & c & f \end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{ccc} b & a & e \\ c & d & f \end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{ccc} a & e & b \\ d & f & c \end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{ccc} d & c & e \\ a & b & f \end{array}\right\} \\ = \left\{\begin{array}{ccc} (a+b-c+d)/2 & (a+b+c-d)/2 & e \\ (a-b+c+d)/2 & (-a+b+c+d)/2 & f \end{array}\right\} \end{aligned} \tag{4.163}$$

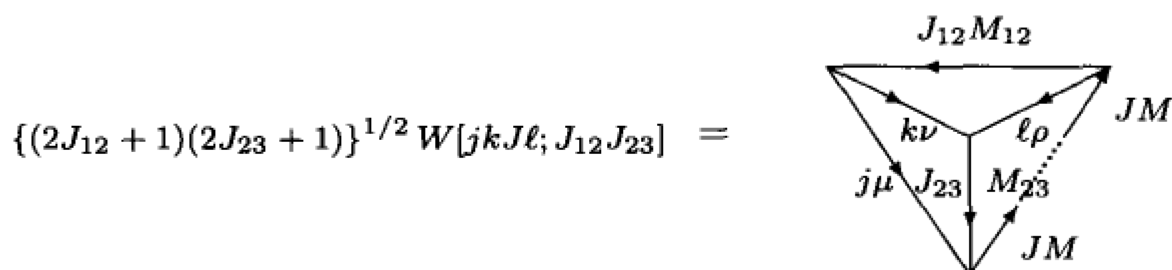
上面这些公式比较复杂, 这里通过图解方法把它们形象地表达出来. 用三根交叉于一点的带箭头的线表克莱布施 – 戈登系数. 克莱布施 – 戈登矩阵是实正交矩阵, 写成矩阵元素时 C 和 C^{-1} 只相差转置, 画成图时它们的箭头方向不同. 当 j(或 k, 或 J) 是恒等表示时, 可把相应的线省掉. 图中的实线代表相应的磁量子数求和, 虚线代表相应的磁量子数相等但不求和. 图 4.2 中 (1) 表 CG 系数, (2) 表 $J=0$ 时的 CG 系数, (3) 表拉卡系数的定义式 (4.157), (4) 表拉卡系数的计算公式 (4.159).



(1) $C^{jk}_{\mu\nu JM}$ (2) $C^{jj}_{\mu(-\mu)00}$



(3) 拉卡系数的定义 (4.157)



(4) 拉卡系数的展开式 (4.159)

图 4.2 克莱布施 - 戈登系数和拉卡系数的图解

4.7 张量和旋量

在第三章我们讨论过标量和标量场的概念, 本章一开始我们又讨论了矢量的概念. 标量和矢量是根据它们在三维空间转动变换中的变换性质来定义的. 在本节, 我们将把标量和矢量的概念推广, 根据量在三维空间转动变换中的变换性质定义张量和旋量. 一般说来, 正如附录 15 所指出的, 数学中的标量、矢量和张量的概念是相对特定的线性变换来定义的. 在第八章和第九章我们将讨论关于 SU(N) 群的张量和 SO(N) 群的张量与旋量. 但是在物理中, 如无特别说明, 张量和旋量通常都是根据它们在三维空间转动变换或洛伦兹 (Lorentz) 变换中的变换性质来确定的.

一、矢量场

设三维空间的任意点 P 的位置矢量为 $\vec{r}=\sum_a \vec{e}_a x_a$, $\vec{e}_a$ 是空间固定坐标系 K 中的矢量基, x_a 是坐标. 在三维空间转动变换 R 中, P 点转到 P' 点, 位置矢量变为 $\vec{r'}$, 它在空间固定的矢量基 $\vec{e}_a$ 中的分量变成 x'_a,

$$\begin{aligned}&\vec{r}=\sum_a \vec{e}_a x_a \xrightarrow{R} \vec{r'}=\sum_a \vec{e}_a x'_a, \\ &x_a \xrightarrow{R} x'_a=\sum_{b=1}^{3} R_{ab}x_b\end{aligned} \tag{4.164}$$

建立固定在系统上, 跟着系统一起转动的坐标系 K', K' 系中的矢量基 $\vec{e'}_a$ 与位置矢量一起转动. 若 $\vec{r'}$ 按 $\vec{e'}_a$ 分解, 则分量仍是原来的坐标 x_a. 由此可推出矢量基 $\vec{e'}_a$ 按下式变换

$$\vec{r'}=\sum_a \vec{e}_a x'_a=\sum_b \vec{e'}_b x_b\ , \qquad \vec{e'}_a=\sum_{b=1}^{3} \vec{e}_b R_{ba} \tag{4.165}$$

在三维空间转动变换 R 中保持不变的量称为标量, 在转动变换中与位置矢量做同样变换的量称为矢量

$$\begin{aligned}&\psi \xrightarrow{R} \psi'=\psi, \\ &\vec{V}=\sum_a \vec{e}_a V_a \xrightarrow{R} \vec{V}'=\sum_a \vec{e}_a V'_a=\sum_b \vec{e'}_b V_b, \\ &V'_a=\sum_{b=1}^{3} R_{ab}V_b\end{aligned} \tag{4.166}$$

矢量有三个分量, 作为一个整体共同描写系统的状态. 矢量分量的变换规则式 (4.166) 可用算符 Q_R 表出

$$V'_a \equiv (Q_R V)_a=\sum_{b=1}^{3} R_{ab}V_b \tag{4.167}$$

对矢量来说, Q_R 就是 R 矩阵; 对标量, Q_R 等于 1.

标量的空间分布称为标量场, 描写标量场的函数称为标量函数. 所谓标量在空间转动变换中保持不变是指, 转动后在 P' 点的标量值等于转动前在 P 点的标量值, 因而描写标量场的函数必须做相应的变化. 标量函数的变化用标量函数变换算符 P_R 来描写

$$\psi'(x) \equiv P_R\psi(x)=\psi(R^{-1}x) \tag{4.168}$$

矢量的空间分布称为矢量场, 描写矢量场的函数称为矢量函数, 在固定的基 $\vec{e}_a$ 中, 矢量函数包括三个分量函数, 它们作为一个整体, 共同描写矢量场. 在空间转动变换中, 一方面转动前在 P 点的矢量转到 P' 点, 另一方面由于转动矢量的方向也

要发生变化. 表现在矢量函数上, 新矢量函数在 P' 点的分量, 与原矢量函数在 P 点的分量按式 (4.167) 发生组合

$$V'(Rx)_a = \sum_{b=1}^{3} R_{ab} V(x)_b$$

与标量场情况类似, 光一个撇不足以说明它是由转动 R 引起的矢量函数的变化. 为此, 引入矢量函数变换算符 O_R

$$[O_R V(Rx)]_a = \sum_{b=1}^{3} R_{ab} V(x)_b$$

把坐标变量重新记作 x, 则

$$[O_R V(x)]_a = \sum_{b=1}^{3} R_{ab} V(R^{-1}x)_b \ , \qquad O_R V(x) = RV(R^{-1}x) \tag{4.169}$$

请与以前对矢量变换的习惯表达方式做比较

$$\begin{aligned} \vec{V}(x) \xrightarrow{R} O_R \vec{V}(x) &= \sum_{a=1}^{3} \vec{e}_a \left[O_R V(x)\right]_a = \sum_{a=1}^{3} \vec{e}_a \sum_{b=1}^{3} R_{ab} V(R^{-1}x)_b \\ &= \sum_{b=1}^{3} \vec{e'}_b V(R^{-1}x)_b \end{aligned} \tag{4.170}$$

可见, O_R 算符的作用分成两部分, 一个是把变换后 P' 点的场和变换前在 P 点的场联系起来, 用算符 P_R 来标记, 另一个是描写矢量方向的转动, 即矢量分量的组合, 用算符 Q_R 来标记. 这两部分作用是独立的, 作用次序可以交换

$$\begin{gathered} O_R = Q_R P_R = P_R Q_R, \\ P_R V(x)_a = V(R^{-1}x)_a \ , \qquad [Q_R V(x)]_a = \sum_{b=1}^{3} R_{ab} V(x)_b \end{gathered} \tag{4.171}$$

初学的读者在矢量基问题上经常会发生混淆. 现在有两个坐标系, 一个是定坐标系 K, 坐标轴向的单位矢量 $\vec{e}_a$ 是固定不变的; 另一个是随系统 (矢量场) 一起转动的坐标系 K', 它的坐标轴向单位矢量 $\vec{e'}_a$ 是随系统一起转动的, 由与 $\vec{e}_a$ 重合的方向转到现在的方向. 在转动 R 中它和一般矢量一样变换, 但要注意它在转动前和 $\vec{e}_a$ 重合, $\vec{e}_a$ 只有一个分量不为零

$$\begin{aligned} (\vec{e}_a)_d \xrightarrow{R} \left(\vec{e'}_a\right)_d &= (Q_R \vec{e}_a)_d = \sum_{b=1}^{3} R_{db} \left(\vec{e}_a\right)_b \\ &= R_{da} = \sum_{b=1}^{3} \left(\vec{e}_b\right)_d R_{ba} \end{aligned} \tag{4.172}$$

这里, 被 Q_R 作用的 $\vec{e}_a$ 不应看作固定的矢量基, 而是变动的矢量基, 它在变换前与定矢量基重合. 如果把矢量场 $\vec{V}(x)$ 按此动矢量基展开, 则转动中矢量方向的变化由矢量基承担, 作为系数的分量不再按式 (4.167) 组合, 但仍要像标量一样, 把变换后在 P' 点的值和变换前在 P 点的值联系起来

$$O_R\vec{V}(x) = \sum_a \{Q_R\vec{e}_a\}\{P_RV(x)_a\} = \sum_a \left\{\sum_b \vec{e}_b R_{ba}\right\} V(R^{-1}x)_a \tag{4.173}$$

矢量场按 K 系还是 K' 系的单位矢量展开, 分量的符号在文献中通常不加区分, 而转动前两坐标系的矢量基又是重合的, 使读者很容易混淆. 如上所述, 这两种分量在转动变换中的变换规则是不同的. 本书为了避免混淆, 把两种分量在符号上予以区分, 在 K 系的分量用粗体表出, 在 K' 系的分量用细体表出. 以后对张量也做类似处理

$$[O_R\boldsymbol{V}(x)]_a = \sum_b R_{ab}\boldsymbol{V}(R^{-1}x)_b, \quad [O_RV(x)]_a = [P_RV(x)]_a = V(R^{-1}x)_a \tag{4.174}$$

把位置矢量 $\vec{r}$ 的分布看作一个矢量场, 这是一个很特殊的矢量场, 因为从原点到空间各点的矢径, 在转动前后都是一样的. 实际上, 式 (4.164) 指出, 位置矢量 $\vec{r}$ 描写 P 点的位置, 经转动变换 R 它转到 $\vec{r'}$, 恰好与转动前 P' 点的位置矢量一致. 用数学语言来说, 设 $\vec{V}(x) = \vec{r}$, 即 $\boldsymbol{V}(x)_a = x_a$, $\boldsymbol{V}(R^{-1}x)_b = \sum_d \left(R^{-1}\right)_{bd} x_d$, 得

$$[O_R\boldsymbol{V}(x)]_a = \sum_b R_{ab}\boldsymbol{V}(R^{-1}x)_b = \sum_{bd} R_{ab}\left(R^{-1}\right)_{bd} x_d = x_a = \boldsymbol{V}(x)_a$$

即

$$O_R\vec{r} = \vec{r}\,, \qquad [Q_R\vec{r}]_a = \sum_b R_{ab}\,[\vec{r}]_b \tag{4.175}$$

重复 3.2 节的讨论可知, O_R 和 Q_R 算符与 P_R 算符一样, 也是线性幺正算符. 对作用在矢量场上的物理量算符 $L(x)$, 在转动变换 R 中, 按下式变换

$$L(x) \xrightarrow{R} O_RL(x)O_R^{-1} \tag{4.176}$$

二、张量场

设系统状态需用 n 个指标, 3^n 个分量作为一个整体来共同描写, 在转动变换 R 中, 每一个指标都按矢量变换规则 (4.174) 发生组合

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{T}_{a_1a_2\cdots a_n} \xrightarrow{R} (O_R\boldsymbol{T})_{a_1a_2\cdots a_n} &= (Q_R\boldsymbol{T})_{a_1a_2\cdots a_n} \\
&= \sum_{b_1b_2\cdots b_n} R_{a_1b_1}\cdots R_{a_nb_n}\boldsymbol{T}_{b_1b_2\cdots b_n} \\
Q_R &= R\times R\times\cdots\times R
\end{aligned} \tag{4.177}$$

按此规则变换的量称为 n 阶张量. 张量的空间分布称为张量场. 张量场用空间坐标的 3^n 个函数作为一个整体来共同描写, 在转动变换 R 中按下式变换

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{T}(x)_{a_1a_2\cdots a_n} \xrightarrow{R} [O_R\boldsymbol{T}(x)]_{a_1a_2\cdots a_n} = \sum_{b_1b_2\cdots b_n} R_{a_1b_1}R_{a_2b_2}\cdots R_{a_nb_n}\boldsymbol{T}(R^{-1}x)_{b_1b_2\cdots b_n}, \\
&O_R = Q_RP_R, \qquad [P_R\boldsymbol{T}(x)]_{a_1a_2\cdots a_n} = \boldsymbol{T}(R^{-1}x)_{a_1a_2\cdots a_n}, \\
&[Q_R\boldsymbol{T}(x)]_{a_1a_2\cdots a_n} = \sum_{b_1b_2\cdots b_n} R_{a_1b_1}R_{a_2b_2}\cdots R_{a_nb_n}\boldsymbol{T}(x)_{b_1b_2\cdots b_n}
\end{aligned} \tag{4.178}$$

标量是零阶张量, 矢量是一阶张量.

三、旋量场

设系统状态需用 $2s+1$ 个分量作为一个整体来共同描写, 在转动变换 R 中, 按下述规律变换

$$\begin{aligned}
\Psi_\sigma^{(s)} \xrightarrow{R} \left(O_R\Psi^{(s)}\right)_\sigma = \left(Q_R\Psi^{(s)}\right)_\sigma = \sum_\lambda D^s_{\sigma\lambda}(R)\Psi_\lambda^{(s)}, \\
Q_R = D^s(R)
\end{aligned} \tag{4.179}$$

按此规则变换的量称为 s 阶旋量. 旋量的空间分布称为旋量场. 旋量场用空间坐标的 $2s+1$ 个函数作为一个整体来共同描写, 在转动变换 R 中按下式变换

$$\begin{aligned}
&\Psi^{(s)}(x)_\sigma \xrightarrow{R} \left[O_R\Psi^{(s)}(x)\right]_\sigma = \sum_\lambda D^s_{\sigma\lambda}(R)\Psi^{(s)}(R^{-1}x)_\lambda, \qquad O_R = Q_RP_R, \\
&\left[P_R\Psi^{(s)}(x)\right]_\sigma = \Psi^{(s)}(R^{-1}x)_\sigma, \qquad \left[Q_R\Psi^{(s)}(x)\right]_\sigma = \sum_\lambda D^s_{\sigma\lambda}(R)\Psi^{(s)}(x)_\lambda
\end{aligned} \tag{4.180}$$

习惯上, 旋量用 $(2s+1)\times 1$ 列矩阵来描写, 只有在专门强调分量时才注上分量指标. 用得最多的旋量是 $s=1/2$ 阶旋量, 称为基本旋量, 简称旋量, 而且经常省略上标 1/2. 基本旋量有两个分量, 用 2×1 列矩阵描写.

旋量基 $e^{(s)}(\rho)$ 是一类特殊的旋量, 共有 $2s+1$ 个旋量基, 它们分别都只有一个分量不为零

$$e^{(s)}(\rho)_\sigma = \delta_{\rho\sigma}$$

其中, 上指标是旋量的阶, 括号内的 ρ 是旋量基的序指标, 括号外的下标是旋量的分量指标. 在转动 R 中

$$\begin{aligned}
e^{(s)}(\rho)_\sigma \quad &\xrightarrow{R} \left[O_Re^{(s)}(\rho)\right]_\sigma = \left[Q_Re^{(s)}(\rho)\right]_\sigma \\
&= \sum_{\lambda=-s}^{s} D^s_{\sigma\lambda}(R)e^{(s)}(\rho)_\lambda = D^s_{\sigma\rho}(R) = \sum_{\lambda=-s}^{s} e^{(s)}(\lambda)_\sigma D^s_{\lambda\rho}(R),
\end{aligned}$$

$$O_R e^{(s)}(\rho) = Q_R e^{(s)}(\rho) = \sum_{\lambda=-s}^{s} e^{(s)}(\lambda) D^s_{\lambda\rho}(R), \qquad P_R e^{(s)}(\rho) = e^{(s)}(\rho) \tag{4.181}$$

旋量基与空间坐标 x 无关, 因而在 P_R 作用下保持不变.

当把旋量场按旋量基分解时, 在转动变换中, 旋量的变换由旋量基承担, 而旋量分量是坐标 x 的函数, 其变换和标量函数一样, 它把变换后在 P' 点的旋量和变换前在 P 点的旋量联系起来

$$\begin{aligned} \Psi^{(s)}(x) &= \sum_{\rho=-s}^{s} e^{(s)}(\rho)\psi_\rho(x) \\ O_R \Psi^{(s)}(x) &= \sum_{\rho=-s}^{s} \left\{Q_R e^{(s)}(\rho)\right\} \{P_R\psi(x)\}_\rho \\ &= \sum_{\lambda} e^{(s)}(\lambda) \left\{ \sum_{\rho} D^s_{\lambda\rho}(R)\psi(R^{-1}x)_\rho \right\} \end{aligned} \tag{4.182}$$

旋量问题中的旋量基和矢量问题中的矢量基很类似.

标量是零阶旋量. 因为转动群自身表示和 D^1 表示等价

$$M^{-1}RM = D^1(R) , \qquad M = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ -\mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

所以矢量可以通过 M 矩阵组合成一阶旋量

$$\vec{V}(x) = \sum_{a=1}^{3} \vec{e}_a V(x)_a = \sum_{\rho=-1}^{1} e^{(1)}(\rho) V^{(1)}(x)_\rho \tag{4.183}$$

$$e^{(1)}(\rho) = \sum_{a=1}^{3} \vec{e}_a M_{a\rho} , \qquad \begin{cases} e^{(1)}(1) = -(\vec{e}_1 + \mathrm{i}\vec{e}_2)/\sqrt{2} \\ e^{(1)}(0) = \vec{e}_3 \\ e^{(1)}(-1) = (\vec{e}_1 - \mathrm{i}\vec{e}_2)/\sqrt{2} \end{cases} \tag{4.184}$$

$$V^{(1)}(x)_\rho = \sum_{a=1}^{3} \left(M^{-1}\right)_{\rho a} V(x)_a, \qquad \begin{cases} V^{(1)}(x)_1 = -[V(x)_1 - \mathrm{i}V(x)_2]/\sqrt{2} \\ V^{(1)}(x)_0 = V(x)_3 \\ V^{(1)}(x)_{-1} = [V(x)_1 + \mathrm{i}V(x)_2]/\sqrt{2} \end{cases} \tag{4.185}$$

四、总角动量算符及其本征函数

旋量函数的变换算符由两部分构成 $O_R = Q_R P_R$. 对无穷小变换, 把 O_R, Q_R 和

P_R 的微量算符分别记作 J_a, S_a 和 L_a

$$\begin{aligned} P_A &= \mathbf{1} - \mathrm{i}\sum_{a=1}^{3} \alpha_a L_a, \\ Q_A &= \mathbf{1} - \mathrm{i}\sum_{a=1}^{3} \alpha_a S_a, \\ O_A &= \mathbf{1} - \mathrm{i}\sum_{a=1}^{3} \alpha_a (L_a + S_a) = \mathbf{1} - \mathrm{i}\sum_{a=1}^{3} \alpha_a J_a \end{aligned} \tag{4.186}$$

其中, S_a 是表示 D^s 的生成元, L_a 是轨道角动量算符, 它们的和记作 J_a

$$J_a = L_a + S_a \tag{4.187}$$

J_a, S_a 和 L_a 都满足典型的角动量对易关系. 设系统状态需用旋量波函数来描写, 系统哈密顿量 $H(x)$ 各向同性, 则 SO(3) 群是系统的对称变换群

$$O_R H(x) = H(x) O_R \tag{4.188}$$

能量为 E 的本征函数集合构成转动变换的不变函数空间. 一方面, 现在的波函数是旋量函数, 在转动变换中要按旋量函数的变换规则 (4.180) 变换. 另一方面, 它们又构成转动变换的不变函数空间, 按旋量函数的规则变换后的函数, 一定可以写成此空间函数基的线性组合

$$O_R \Psi_\mu(x) = D^s(R) \Psi_\mu(R^{-1}x) = \sum_\nu \Psi_\nu(x) D_{\nu\mu}(R)$$

组合系数排成矩阵, 它们的集合构成转动群的一个表示 D. 用群论方法把此表示约化成不可约表示直和, 同时本征函数也组合成属不可约表示确定行的函数 $\Psi_\mu^j(x)$

$$O_R \Psi_\mu^j(x) = D^s(R) \Psi_\mu^j(R^{-1}x) = \sum_\nu \Psi_\nu^j(x) D_{\nu\mu}^j(R) \tag{4.189}$$

把上式写成生成元的关系, 得

$$\begin{aligned} &J_3 \Psi_\mu^j(x) = \mu \Psi_\mu^j(x), \\ &J_\pm \Psi_\mu^j(x) = \Gamma_{\mp\mu}^j \Psi_{\mu\pm1}^j(x), \\ &J^2 \Psi_\mu^j(x) = j(j+1) \Psi_\mu^j(x), \\ &J^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2\ , \qquad J_\pm = J_1 \pm \mathrm{i} J_2 \end{aligned} \tag{4.190}$$

属不可约表示确定行的旋量函数 $\Psi_\mu^j(x)$ 是 J_3 和 J^2 的共同本征函数, 而不再是轨道角动量 L_3 和 L^2 的本征函数. 球对称系统应该有角动量守恒, 但对用旋量波函数描

写的系统, 守恒的不是轨道角动量, 而是轨道角动量 L_a 和另一个量 S_a 之和. 这个 S_a 与旋量有关, 满足角动量典型的对易关系, 它应该是实验中已测到的自旋角动量的数学描述. 因此, S_a 称为自旋角动量算符, J_a 称为总角动量算符.

由式 (4.181) 可知, 旋量基 $e^{(s)}(\rho)$ 是总角动量算符和自旋角动量算符的共同本征函数

$$\begin{aligned} J_3 e^{(s)}(\rho) &= S_3 e^{(s)}(\rho) = \ \rho e^{(s)}(\rho), \\ J_\pm e^{(s)}(\rho) &= S_\pm e^{(s)}(\rho) = \ \Gamma^s_{\mp\rho} e^{(s)}(\rho \pm 1), \\ J^2 e^{(s)}(\rho) &= S^2 e^{(s)}(\rho) = \ s(s+1) e^{(s)}(\rho), \\ S^2 &= S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 \ , \qquad S_\pm = S_1 \pm \mathrm{i} S_2 \end{aligned} \tag{4.191}$$

五、球旋函数

球函数是轨道角动量的本征函数, 在 Q_R 作用下保持不变, 旋量基是自旋角动量的本征函数, 在 P_R 作用下保持不变. 它们相当于两个子系统的波函数, 整个系统的波函数可写成它们的乘积. 把它们用克莱布施 – 戈登系数组合成总角动量的本征函数, 称为球旋函数

$$\mathrm{Y}^{j\ell s}_\mu(\hat{\boldsymbol{n}}) = \sum_\rho C^{\ell s}_{(\mu-\rho)\rho j\mu} \mathrm{Y}^\ell_{\mu-\rho}(\hat{\boldsymbol{n}}) e^{(s)}(\rho) \tag{4.192}$$

球旋函数本身是 s 阶旋量, 上式是旋量等式, 是 $(2s+1)\times 1$ 矩阵等式. 因为在组合中只有磁量子数求和, 所以球旋函数还是 L^2 和 S^2 的本征函数

$$\begin{aligned} & J^2 \mathrm{Y}^{j\ell s}_\mu(\hat{\boldsymbol{n}}) = j(j+1)\mathrm{Y}^{j\ell s}_\mu(\hat{\boldsymbol{n}}) \ , \qquad J_3 \mathrm{Y}^{j\ell s}_\mu(\hat{\boldsymbol{n}}) = \mu \mathrm{Y}^{j\ell s}_\mu(\hat{\boldsymbol{n}}), \\ & J_\pm \mathrm{Y}^{j\ell s}_\mu(\hat{\boldsymbol{n}}) = \Gamma^j_{\mp\mu} \mathrm{Y}^{j\ell s}_{\mu\pm 1}(\hat{\boldsymbol{n}}), \\ & L^2 \mathrm{Y}^{j\ell s}_\mu(\hat{\boldsymbol{n}}) = \ell(\ell+1)\mathrm{Y}^{j\ell s}_\mu(\hat{\boldsymbol{n}}) \ , \qquad S^2 \mathrm{Y}^{j\ell s}_\mu(\hat{\boldsymbol{n}}) = s(s+1)\mathrm{Y}^{j\ell s}_\mu(\hat{\boldsymbol{n}}) \end{aligned} \tag{4.193}$$

对 1/2 阶旋量, $s = 1/2$ 是固定的, 不必标出. 对确定的 j, 有两个可能的 ℓ 值, $\ell = j \pm 1/2$. 定义物理量 κ

$$J^2 = \left(\vec{L} + \vec{S}\right)^2 = L^2 + S^2 + 2\vec{L}\cdot\vec{S} \tag{4.194}$$

$$\kappa = 2\vec{L}\cdot\vec{S} + 1 = \left(J^2 - L^2 - S^2\right) + 1 \tag{4.195}$$

它在球旋函数中的本征值 (也记作 κ) 是非零整数

$$\kappa = j(j+1) - \ell(\ell+1) + \frac{1}{4} = \begin{cases} j + 1/2 > 0, & \text{当} \ \ell = j - 1/2 \\ -j - 1/2 < 0, & \text{当} \ \ell = j + 1/2 \end{cases} \tag{4.196}$$

一个量子数 κ 同时确定了三个量子数 $j=|\kappa|-1/2$, $\ell=j-\kappa/(2|\kappa|)$ 和 $s=1/2$. 把具体 CG 系数式 (4.141) 代入式 (4.192), 得自旋为 1/2 的球旋函数是

$$\Psi_{|\kappa|\mu}(x)=\begin{pmatrix}\left(\dfrac{j+\mu}{2j}\right)^{1/2}\mathrm{Y}^{j-1/2}_{\mu-1/2}(\hat{\boldsymbol{n}})\\\left(\dfrac{j-\mu}{2j}\right)^{1/2}\mathrm{Y}^{j-1/2}_{\mu+1/2}(\hat{\boldsymbol{n}})\end{pmatrix},\qquad\begin{array}{l}\kappa=1,2,\cdots\\\ell=j-1/2=\kappa-1\end{array}$$

$$\Psi_{-|\kappa|\mu}(x)=\begin{pmatrix}-\left(\dfrac{j-\mu+1}{2j+2}\right)^{1/2}\mathrm{Y}^{j+1/2}_{\mu-1/2}(\hat{\boldsymbol{n}})\\\left(\dfrac{j+\mu+1}{2j+2}\right)^{1/2}\mathrm{Y}^{j+1/2}_{\mu+1/2}(\hat{\boldsymbol{n}})\end{pmatrix},\qquad\begin{array}{l}\kappa=-1,-2,\cdots\\\ell=j+1/2=-\kappa\end{array}\tag{4.197}$$

附录 16 计算了 J^2, J_3, S^2 和 $\vec{S}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}$ 的共同本征函数, 从方法上有典型意义.

4.8 不可约张量算符及其矩阵元

本节引入不可约张量算符的概念, 并通过量子力学中的几个例子, 说明群论方法在物理中的应用.

一、不可约张量算符

在量子力学中, 描写系统的波函数可以是标量、矢量、旋量或张量等, 它们在转动变换中按下式变换

$$\Psi(x)\xrightarrow{R}O_R\Psi(x)=Q_R\Psi(R^{-1}x)$$

而作用在波函数上的算符, 可以是坐标算符 x_a, 微商算符 $\partial/\partial x_a$, 矩阵算符 σ_a, 及其特定的组合, 它们在转动变换中做算符变换

$$L(x)\xrightarrow{R}O_RL(x)O_R^{-1}$$

如果算符在转动变换中保持不变, 则称为标量算符, 或称为对称算符. 但一般说来, 算符形式在转动变换中会发生变化. 如果若干个算符构成一个封闭体系, 它们经转动变换后, 仍可用这些算符的线性组合来表达, 则组合系数构成 SO(3) 群的一个表示. 适当组合这些算符, 可使对应的表示为不可约表示. 如果 $2k+1$ 个算符 $L^k_\rho(x)$ 构成封闭体系, 在转动变换中按 SO(3) 群的不可约表示 D^k 来组合, 则这些算符称为 k 阶不可约张量算符

$$O_RL^k_\rho(x)O_R^{-1}=\sum_\lambda L^k_\lambda(x)D^k_{\lambda\rho}(R)\tag{4.198}$$

零阶不可约张量算符就是标量算符. 一阶不可约张量算符也称矢量算符. 不可约张量算符中的每一个都独立地描写一定的物理量, 只是在转动变换中不同下标的算符存在特定的联系. 张量或旋量波函数的各分量, 必须合在一起作为一个整体, 才完整地描写系统的状态. 在这意义上讲, 不可约张量算符与张量场或旋量场不同, 它更像属不可约表示特定行的函数.

把式 (4.198) 写成生成元的关系式, 有

$$\begin{aligned}&\left[J_3,\ L_\rho^k(x)\right]=\rho L_\rho^k(x),\\&\left[J_\pm,\ L_\rho^k(x)\right]=\left\{(k\mp\rho)(k\pm\rho+1)\right\}^{1/2}L_{\rho\pm1}^k(x),\\&\sum_{a=1}^{3}\ \left[J_a,\ \left[J_a,\ L_\rho^k(x)\right]\right]=k(k+1)L_\rho^k(x)\end{aligned}\tag{4.199}$$

此式也可作为 k 阶不可约张量算符的定义.

不可约张量算符是根据算符在转动变换中的变换性质来定义的, 与算符本身是坐标算符, 微商算符或矩阵算符无关. 与电或磁的多极跃迁相联系的球函数算符是一个典型的不可约张量算符

$$O_R\mathrm{Y}_\rho^k(\hat{\boldsymbol{n}})O_R^{-1}=P_R\mathrm{Y}_\rho^k(\hat{\boldsymbol{n}})P_R^{-1}=\sum_\lambda\ \mathrm{Y}_\lambda^k(\hat{\boldsymbol{n}})D_{\lambda\rho}^k(R)\tag{4.200}$$

当系统用旋量波函数描写时, 通常把 P_R 的作用称为轨道空间转动, Q_R 的作用称为自旋空间转动, 而 O_R 的作用才称为空间转动. 因此多极跃迁算符 $\mathrm{Y}_\rho^k(\hat{\boldsymbol{n}})$ 是空间转动和轨道空间转动的 k 阶不可约张量算符, 是自旋空间转动的标量算符.

电偶极跃迁算符 Y_μ^1 是矢量算符, 它们实际上是坐标算符的组合

$$\begin{aligned}&\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\ r\mathrm{Y}_1^1(\hat{\boldsymbol{n}})=-\frac{1}{\sqrt{2}}(x_1+\mathrm{i}x_2),\\&\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\ r\mathrm{Y}_0^1(\hat{\boldsymbol{n}})=x_3,\\&\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\ r\mathrm{Y}_{-1}^1(\hat{\boldsymbol{n}})=\frac{1}{\sqrt{2}}(x_1-\mathrm{i}x_2),\\&O_R\mathrm{Y}_\rho^1(\hat{\boldsymbol{n}})O_R^{-1}=P_R\mathrm{Y}_\rho^1(\hat{\boldsymbol{n}})P_R^{-1}=\sum_\lambda\ \mathrm{Y}_\lambda^1(\hat{\boldsymbol{n}})D_{\lambda\rho}^1(R),\\&O_Rx_aO_R^{-1}=P_Rx_aP_R^{-1}=\sum_b\ x_bR_{ba}\ ,\qquad Q_Rx_aQ_R^{-1}=x_a\end{aligned}\tag{4.201}$$

坐标算符 x_a 是空间转动和轨道空间转动的矢量算符, 自旋空间转动的标量算符. 把式 (4.201) 写成生成元形式

$$[J_a,x_b]=[L_a,x_b]=\mathrm{i}\sum_{d=1}^{3}\ \epsilon_{abd}x_d\ ,\qquad [S_a,x_b]=0\tag{4.202}$$

式 (4.202) 给出的对易关系, 我们在量子力学中早已熟悉. 类似的有

$$\begin{aligned}
&[J_a, p_b] = [L_a, p_b] = \mathrm{i}\sum_{d=1}^{3} \epsilon_{abd} p_d \ , \qquad [S_a, p_b] = 0, \\
&[J_a, L_b] = [L_a, L_b] = \mathrm{i}\sum_{d=1}^{3} \epsilon_{abd} L_d \ , \qquad [S_a, L_b] = 0, \\
&[J_a, J_b] = \mathrm{i}\sum_{d=1}^{3} \epsilon_{abd} J_d, \\
&[J_a, S_b] = [S_a, S_b] = \mathrm{i}\sum_{d=1}^{3} \epsilon_{abd} S_d \ , \qquad [L_a, S_b] = 0
\end{aligned} \tag{4.203}$$

$$\begin{aligned}
&O_R p_a O_R^{-1} = P_R p_a P_R^{-1} = \sum_b p_b R_{ba} \ , \qquad Q_R p_a Q_R^{-1} = p_a, \\
&O_R L_a O_R^{-1} = P_R L_a P_R^{-1} = \sum_b L_b R_{ba} \ , \qquad Q_R L_a Q_R^{-1} = L_a, \\
&O_R J_a O_R^{-1} = \sum_b J_b R_{ba}, \\
&O_R S_a O_R^{-1} = Q_R S_a Q_R^{-1} = \sum_b S_b R_{ba} \ , \qquad P_R S_a P_R^{-1} = S_a
\end{aligned} \tag{4.204}$$

动量算符 p_a 和轨道角动量算符 L_a 也是空间转动和轨道空间转动的矢量算符, 自旋空间转动的标量算符; 自旋算符 S_a 是空间转动和自旋空间转动的矢量算符, 轨道空间转动的标量算符; 总角动量算符 J_a 是空间转动的矢量算符. 按照式 (4.121) 的方法, 很容易写出这些算符在 $\hat{\boldsymbol{n}}(\theta,\varphi)$ 方向的分量

$$\begin{aligned}
&\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\vec{r} = O_R x_3 O_R^{-1} = P_R x_3 P_R^{-1}, \\
&\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\vec{p} = O_R p_3 O_R^{-1} = P_R p_3 P_R^{-1}, \\
&\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\vec{L} = O_R L_3 O_R^{-1} = P_R L_3 P_R^{-1}, \qquad R = R(\varphi,\theta,0) \\
&\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\vec{J} = O_R J_3 O_R^{-1}, \\
&\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\vec{S} = O_R S_3 O_R^{-1} = Q_R S_3 Q_R^{-1},
\end{aligned} \tag{4.205}$$

二、维格纳–埃伽定理

对于球对称系统, 能量本征函数可以组合成属不可约表示确定行的函数

$$\begin{aligned}
&O_R \Psi^j_\mu(x) = \sum_\nu \Psi^j_\nu(x) D^j_{\nu\mu}(R), \\
&O_R \Phi^{j'}_{\mu'}(x) = \sum_{\nu'} \Phi^{j'}_{\nu'}(x) D^{j'}_{\nu'\mu'}(R)
\end{aligned}$$

可以利用对称性质计算不可约张量算符在这样函数基中的矩阵元. 因为

$$\begin{aligned} O_R\left\{L_\rho^k(x)\,\Psi_\mu^j(x)\right\} &= \left\{O_R L_\rho^k(x) O_R^{-1}\right\}\left\{O_R\,\Psi_\mu^j(x)\right\} \\ &= \sum_{\lambda\nu}\ \left\{L_\lambda^k(x)\,\Psi_\nu^j(x)\right\}\left\{D_{\lambda\rho}^k(R) D_{\nu\mu}^j(R)\right\} \end{aligned}$$

$L_\rho^k(x)\,\Psi_\mu^j(x)$ 按直乘表示变换, 可用 CG 系数把它们组合成按不可约表示变换的函数 $F_M^J(x)$

$$\begin{aligned} F_M^J(x) &= \sum_\rho\ L_\rho^k(x)\,\Psi_{M-\rho}^j(x) C_{\rho(M-\rho)JM}^{kj}, \\ L_\rho^k(x)\,\Psi_\mu^j(x) &= \sum_J\ F_{\rho+\mu}^J(x) C_{\rho\mu J(\rho+\mu)}^{kj}, \\ O_R F_M^J(x) &= \sum_{M'}\ F_{M'}^J(x) D_{M'M}^J(R) \end{aligned} \tag{4.206}$$

由维格纳 – 埃伽定理

$$\langle \Phi_{\mu'}^{j'}(x)|F_M^J(x)\rangle = \delta_{j'J}\delta_{\mu'M}\ c \tag{4.207}$$

其中, 常数 c 与下标 μ' 和 M 无关, 它与 Φ, L 和 Ψ 的具体形式有关, 也与指标 j', k 和 j 有关, 通常记作 $\langle \Phi^{j'}||L^k||\Psi^j\rangle$, 称为约化矩阵元. 因此

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\mu'}^{j'}(x)|L_\rho^k(x)|\,\Psi_\mu^j(x)\rangle &= \sum_J\ C_{\rho\mu J(\rho+\mu)}^{kj}\langle \Phi_{\mu'}^{j'}(x)|F_{\rho+\mu}^J(x)\rangle \\ &= C_{\rho\mu j'\mu'}^{kj}\langle \Phi^{j'}||L^k||\,\Psi^j\rangle \end{aligned} \tag{4.208}$$

原来要计算 $(2j'+1)(2k+1)(2j+1)$ 个矩阵元, 现在简化为只要计算一个矩阵元, 而且可以挑选最合适的下标 μ', ρ 和 μ 来计算, 用这个矩阵元的计算结果来确定约化矩阵元. 换句话说, 这么多个矩阵元通过转动变换联系起来, 维格纳 – 埃伽定理把矩阵元中与转动变换有关的性质分离出来, 由克莱布施 – 戈登系数来描述, 而与转动变换无关的性质, 即与波函数和算符具体形式有关的性质保留在约化矩阵元中. 这样维格纳 – 埃伽定理充分发挥了对称性的作用, 大大简化了计算工作量.

进一步, 在很多情况下, 甚至连一个矩阵元也难以计算. 此时仍可用维格纳 – 埃伽定理, 把约化矩阵元作为参数, 根据波函数和算符在转动变换中的变换性质, 确定不同矩阵元之间的相对值, 特别是确定矩阵元不为零的条件, 量子力学中称为选择定则. 这些从对称性质直接得到的精确的性质, 可以和实验比较, 符合与否直接反映该系统是否具有此种对称性质. 例如, 式 (4.208) 中的 CG 系数在不满足下列条件时一定为零

$$\begin{aligned} &|\mu'| = |\rho+\mu| \leqslant j'\ , \qquad |\rho| \leqslant k\ , \qquad |\mu| \leqslant j, \\ &|k-j| \leqslant j' \leqslant k+j \end{aligned} \tag{4.209}$$

这就是此矩阵元可能不为零的条件, 即选择定则.

不仅可以根据波函数和算符在空间转动 O_R 中的性质, 给出系统的重要性质, 在很多情况下, 波函数和算符在 P_R 和 Q_R 作用下的变换性质也是清楚的, 由这些性质也可以得到系统的许多有用的性质. 下面我们举几个量子力学中的实例来说明群论方法在物理中的应用.

三、电偶极辐射的选择定则和谱线相对强度

尽管自由原子的内部结构可能相当复杂, 但整个系统是各向同性的, 转动群是它的对称变换群, 能量本征函数可以组合成属转动群表示 D^J M 行的函数. 用量子力学的语言来说, 就是一定可以找到 H, J^2 和 J_3 的共同本征函数 $\Psi_M^J(x)$. 在两个有确定角动量状态间的电偶极跃迁, 产生电偶极辐射, 辐射强度即跃迁概率正比于

$$|\langle \Psi_{M'}^{J'}(x)|x_a|\Psi_M^J(x)\rangle|^2 \tag{4.210}$$

这公式在任何一本量子力学的书中都可以找到. 可直观地理解为电偶极矩正比于电荷拉开的距离. 我们现在要研究 x_a 算符的转动变换性质. 式 (4.201) 指出, x_a 算符是矢量算符, 经适当组合后 [见式 (4.201)], 正比于球函数 Y_ρ^1

$$O_R \mathrm{Y}_\rho^1 O_R^{-1} = P_R \mathrm{Y}_\rho^1 P_R^{-1} = \sum_\lambda \mathrm{Y}_\lambda^1 D_{\lambda\rho}^1(R) , \qquad Q_R \mathrm{Y}_\rho^1 Q_R^{-1} = \mathrm{Y}_\rho^1 \tag{4.211}$$

由量子力学知, 电偶极辐射强度与 $|\langle \Psi_{M'}^{J'}|\mathrm{Y}_\rho^1|\Psi_M^J\rangle|^2$ 成正比, $\rho=0$ 的电偶极辐射是沿 x_3 方向偏振的平面偏振光, $\rho=\pm1$ 的辐射是在 x_1x_2 平面内的圆偏振光. 如果相应矩阵元为零, 则此跃迁被禁戒. 反之, 矩阵元不为零的条件称为该跃迁的选择定则.

由维格纳–埃伽定理得

$$\langle \Psi_{M'}^{J'}(x)|\mathrm{Y}_\rho^1(\hat{\boldsymbol{n}})|\Psi_M^J(x)\rangle = C_{\rho M J' M'}^{1J}\langle \Psi^{J'}\|\mathrm{Y}^1\|\Psi^J\rangle \tag{4.212}$$

由 CG 系数不为零的条件, 得电偶极跃迁选择定则为

$$\Delta M = M' - M = \rho = 0 \ \text{或} \ \pm 1 , \qquad |J-1| \leqslant J' \leqslant J+1 \tag{4.213}$$

ρ 等于 0 或 ±1 分别与平面偏振光或圆偏振光相对应. 因为 $J=0$ 时 J' 只能等于 1, 不能等于 0, 所以通常把 J' 的选择定则统一地记作

$$\Delta J = J' - J = \pm 1 \ \text{或} \ 0 , \qquad 0 \not\longrightarrow 0$$

读作“零零跃迁禁戒”. 若考虑空间反演, 因 x_a 是奇宇称, 故初末态宇称必须相反.

如果系统自旋轨道耦合较弱, 能量本征函数可以表成有确定轨道角动量和自旋角动量的波函数乘积, 量子力学中称为 L-S 耦合

$$\Psi_M^{JLS} = \sum_\sigma C_{(M-\sigma)\sigma JM}^{LS} \Psi_{M-\sigma}^L W_\sigma^S \tag{4.214}$$

Ψ_M^{JLS} 是 J^2, J_3, L^2 和 S^2 的共同本征函数. 对这样的情况, 还可根据波函数和算符在 P_R 和 Q_R 作用下的变换性质式 (4.211), 得到附加的选择定则

$$\begin{aligned} &\Delta L = L' - L = \pm 1 \text{ 或 } 0, \qquad 0 \not\longrightarrow 0 \\ &\Delta S = S' - S = 0 \end{aligned} \tag{4.215}$$

注意, 对 n 个电子的复杂系统, 宇称未必等于 $(-1)^L$, 因而 $\Delta L = 0$ 的跃迁不一定破坏宇称守恒.

辐射相对强度与 CG 系数平方成比例

$$\begin{aligned} &|\langle \Psi_{M+1}^{J'}|\mathrm{Y}_1^1|\Psi_M^J\rangle|^2 \ : \ |\langle \Psi_M^{J'}|\mathrm{Y}_0^1|\Psi_M^J\rangle|^2 \ : \ |\langle \Psi_{M-1}^{J'}|\mathrm{Y}_{-1}^1|\Psi_M^J\rangle|^2 \\ &= \left(C_{1MJ'(M+1)}^{1J}\right)^2 \ : \ \left(C_{0MJ'M}^{1J}\right)^2 \ : \ \left(C_{(-1)MJ'(M-1)}^{1J}\right)^2 \end{aligned} \tag{4.216}$$

例如, $J' = J - 1$ 时, 由式 (4.141)[或式 (A13.22)] 查得此比为

$$(J-M)(J-M-1) \ : \ 2(J-M)(J+M) \ : \ (J+M)(J+M-1)$$

对于给定的 J', J 和 M, 辐射相对总强度正比于

$$\sum_{\rho=-1}^{1} \left(C_{\rho M J'(M+\rho)}^{1J}\right)^2 = \frac{2J'+1}{2J+1} \sum_{\rho=-1}^{1} \left(C_{\rho(-M-\rho)J(-M)}^{1J'}\right)^2 = \frac{2J'+1}{2J+1}$$

它与 M 无关, 说明总跃迁概率与角动量矢量的空间取向无关.

* 四、兰德因子和塞曼效应

斯特恩 (Stern)– 盖拉赫 (Gerlach) 实验发现, 狭窄的 S 态氢原子束通过不均匀磁场时发生偏转, 在照相底片上出现两条谱线, 说明原子具有磁矩. 这是发现电子自旋的最早实验, 并测得自旋角动量的回转磁比率 (geromagnetic ratio) 比轨道角动量的回转磁比率大一倍. 因此原子的总磁矩算符 $\mathcal{M}_a$ 表为

$$\mathcal{M}_a = -\frac{e}{2m_e}(L_a + 2S_a) = -\frac{e}{2m_e}(J_a + S_a) = -\frac{egJ_a}{2m_e} \tag{4.217}$$

因取自然单位, $c = \hbar = 1$. 上式中, m_e 是电子质量, g 称为兰德 (Landé) 因子. 在状态 Ψ_M^J 中磁矩第三分量的平均值为

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{M}_3} = \langle \Psi_M^J|\mathcal{M}_3|\Psi_M^J\rangle = \frac{-egM}{2m_e} = -\frac{eM}{2m_e} - \frac{e}{2m_e}\langle \Psi_M^J|S_3|\Psi_M^J\rangle \\ (g-1)M = \langle \Psi_M^J|S_3|\Psi_M^J\rangle \end{aligned} \tag{4.218}$$

由于 J_a 和 S_a 都是矢量算符, 它们在相同状态中的矩阵元成比例

$$\langle \Psi_M^J|S_a|\Psi_{M'}^J\rangle = A_J\langle \Psi_M^J|J_a|\Psi_{M'}^J\rangle \tag{4.219}$$

比例系数 A_J 与磁量子数 M 和 M' 无关. 因为 $J_a\Psi_M^J$ 可表为 $\Psi_{M'}^J$ 的线性组合, 把它代替式 (4.219) 中的 $\Psi_{M'}^J$, 等式仍成立, 即

$$\sum_{a=1}^{3}\langle\Psi_M^J|S_aJ_a|\Psi_M^J\rangle = A_J\sum_{a=1}^{3}\langle\Psi_M^J|J_aJ_a|\Psi_M^J\rangle = A_JJ(J+1)$$

如果 Ψ_M^J 是通过 L-S 耦合构成的状态 [见式 (4.214)], 则它同时是 L^2 和 S^2 的共同本征函数. 因为

$$\sum_{a=1}^{3} L_a^2 = \sum_{a=1}^{3}(J_a-S_a)^2 = \sum_{a=1}^{3} J_a^2 + \sum_{a=1}^{3} S_a^2 - 2\sum_{a=1}^{3} S_aJ_a,$$

$$\sum_{a=1}^{3}\langle\Psi_M^J|S_aJ_a|\Psi_M^J\rangle = \{J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)\}/2$$

得

$$A_J = \frac{J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}$$

在式 (4.219) 中取 $a=3$, $M'=M$, 与式 (4.218) 比较, 得

$$g = 1 + A_J = \frac{3J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)} \tag{4.220}$$

对于单个电子, $S=1/2$, $L=J\mp 1/2$, 有

$$g = \begin{cases} \dfrac{2J+1}{2J}, & \text{当 } L = J-\dfrac{1}{2} \\ \dfrac{2J+1}{2(J+1)}, & \text{当 } L = J+\dfrac{1}{2} \end{cases} \tag{4.221}$$

现在把原子置于沿 x_3 轴方向的磁场中, 如果磁场足够强, 自旋轨道耦合作用可以忽略, 波函数用 $\psi_m^L W_\sigma^S$ 来描写, 对应能量为

$$E = E_0 + \frac{e}{2m_e}(m+2\sigma)H \tag{4.222}$$

E_0 为尚未引入磁场时系统的能量, 在磁场中系统能级的改变与 L 和 S 无关.

电偶极跃迁选择定则为

$$\begin{aligned} &\Delta L = \pm 1 \text{ 或 } 0\,, \qquad 0 \not\longrightarrow 0, \\ &\Delta m = \pm 1,\ 0\,, \qquad \Delta S = 0\,, \qquad \Delta\sigma = 0 \end{aligned} \tag{4.223}$$

因此电偶极辐射的光子能量为

$$\Delta E = \begin{cases} \Delta E_0, & \text{当 } \Delta m = 0\,,\ \text{沿 } x_3 \text{ 轴偏振的平面偏振光} \\ \Delta E_0 \mp \dfrac{eH}{2m_e}, & \text{当 } \Delta m = \pm 1\,,\ \text{在 } x_1x_2 \text{ 平面内的圆偏振光} \end{cases} \tag{4.224}$$

当沿磁场方向 (x_3 轴) 观测时, 看不见平面偏振光, 只能看见等距离地偏离原谱线 (ΔE_0) 的两条圆偏振光, 移向红光方向的是左偏振光 ($m-m'=-\Delta m=-1$), 移向紫光方向的是右偏振光 ($m-m'=1$). 当沿垂直磁场方向观测时, 看到三条谱线, 两侧的谱线与沿磁场方向观测的谱线相同, 中间一条是沿 x_3 方向的平面偏振光. 这种在较强磁场中观测到的谱线分裂的现象称为简单塞曼 (Zeeman) 效应 [见图 4.3].

在弱磁场中, 自旋轨道耦合作用不能忽略, 波函数用式 (4.214) 给出的 Ψ_M^{JLS} 来描写, 在磁场中的能级为

$$E = E_0 + \frac{e}{2m_e} gMH$$

现在 ΔE 与 J, L, S 和 M 都有关, 因此观测到的谱线分裂情况与初末态的角动量量子数有关

$$\Delta E = \Delta E_0 + \frac{eH}{2m_e}(gM - g'M') \tag{4.225}$$

这种谱线分裂现象称为复杂塞曼效应.

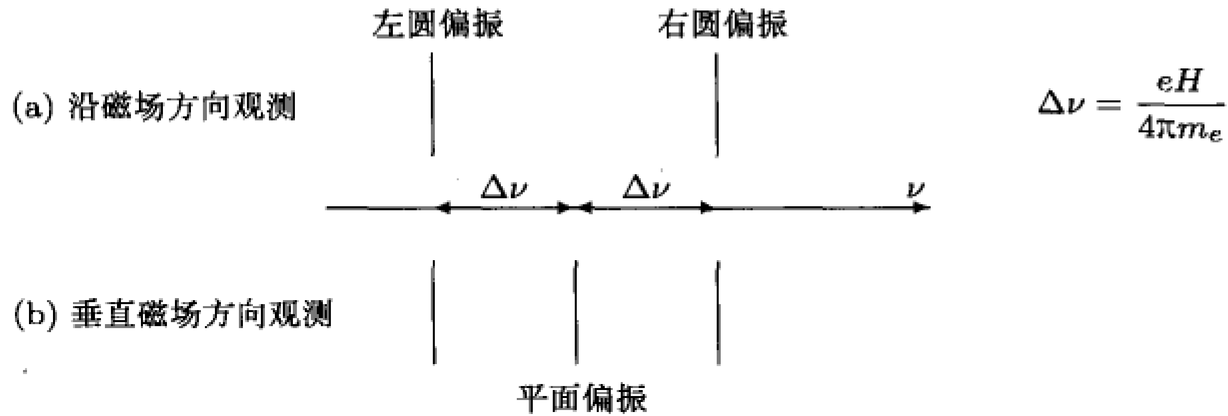


图 4.3　简单塞曼效应

* 五、自旋轨道耦合引起的能级分裂

自由原子总哈密顿量为

$$H = H_e + H_{LS} + H_{SS}$$

其中, H_e 是哈密顿量的主要项, 自旋轨道耦合 H_{LS} 可以看成微扰, 自旋自旋耦合 H_{SS} 通常可以忽略.

$$H_e = -\frac{1}{2m_e}\sum_i \nabla_i^2 - \sum_i \frac{Ze^2}{r} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{r_{ij}}$$

$$H_{LS} = \sum_i \xi(r_i)\left(\vec{\ell}_i \cdot \vec{s}_i\right)$$

$\xi(r_i)$ 在转动变换中保持不变.

H_e 只与空间坐标有关, 它是各向同性的, 在 O_R, Q_R 和 P_R 作用下都保持不变, 本征函数可以取有确定 L^2, L_3, S^2 和 S_3 的波函数 $\psi_m^L W_\sigma^S$, 也可以取有确定 J^2, J_3, L^2 和 S^2 的波函数 Ψ_M^{JLS}

$$\Psi_M^{JLS} = \sum_\sigma C_{(M-\sigma)\sigma JM}^{LS} \Psi_{M-\sigma}^L W_\sigma^S \tag{4.226}$$

而微扰哈密顿量 H_{LS} 只对 O_R 保持不变, 在转动变换中的变换性质与 $\vec{L}\cdot\vec{S}$ 相同, 因此式 (4.226) 仍是好的零级波函数. 尽管 $\psi_m^L W_\sigma^S$ 不是好的零级波函数, 但根据算符在转动变换中的变换性质, 有

$$\langle \psi_{m'}^L W_{\sigma'}^S | H_{LS} | \psi_m^L W_\sigma^S \rangle = \zeta(LS) \langle \psi_{m'}^L W_{\sigma'}^S | \vec{L}\cdot\vec{S} | \psi_m^L W_\sigma^S \rangle$$

当用 CG 系数把 $\psi_m^L W_\sigma^S$ 组合成 Ψ_M^{JLS} 时, 约化矩阵元 $\zeta(LS)$ 不变. 因此能量一级微扰为

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= \langle \psi_M^{JLS} | H_{LS} | \Psi_M^{JLS} \rangle \\ &= \zeta(LS) \langle \psi_M^{JLS} | \vec{L}\cdot\vec{S} | \psi_M^{JLS} \rangle \\ &= \frac{1}{2}\zeta(LS)\left\{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\right\} \end{aligned} \tag{4.227}$$

其中用到式 (4.194).

引入微扰哈密顿量 H_{LS} 后, 相同 L 和 S 不同 J 的状态能级发生分裂, 而能级的修正对 J 的依赖关系已在式 (4.227) 中明显地显示出来了. 例如, $L=1$, $S=3/2$ 的状态, 在原子物理中用符号 ${}^4P_J$ 标记, 其中总角动量 J 可取 5/2, 3/2 和 1/2 三个数值, 它们的能级修正分别是

$$\begin{aligned} E_{5/2}^{(1)} &= \frac{1}{2}\zeta({}^4P)\left\{\frac{5}{2}\left(\frac{5}{2}+1\right) - 1(1+1) - \frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}+1\right)\right\} = \frac{3}{2}\zeta({}^4P) \\ E_{3/2}^{(1)} &= \frac{1}{2}\zeta({}^4P)\left\{\frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}+1\right) - 1(1+1) - \frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}+1\right)\right\} = -\zeta({}^4P) \\ E_{1/2}^{(1)} &= \frac{1}{2}\zeta({}^4P)\left\{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) - 1(1+1) - \frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}+1\right)\right\} = -\frac{5}{2}\zeta({}^4P) \\ E_{5/2}^{(1)} &: E_{3/2}^{(1)} : E_{1/2}^{(1)} = 3 : (-2) : (-5) \end{aligned}$$

为了计算 $\zeta(LS)$, 还需引入进一步的近似模型. 例如, 引进哈特里 – 福克 (Hartree-Fock) 近似, 并结合转动对称性质, 可得到关于 $\zeta(LS)$ 更多的知识.

习　题

1. 用数学归纳法证明辅助公式

$$\begin{aligned} e^\alpha \beta e^{-\alpha} &= \beta + \frac{1}{1!}[\alpha,\ \beta] + \frac{1}{2!}[\alpha,\ [\alpha,\ \beta]] + \cdots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}[\alpha,\ [\alpha,\ \cdots\ [\alpha,\ \beta]\cdots]] \end{aligned}$$

其中, α 和 β 是同维矩阵. 再利用此辅助公式证明

$$u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)\sigma_a u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)^{-1}=\sum_{b=1}^{3}\ \sigma_b R_{ba}(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$$

其中

$$u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)=\exp\left(-\mathrm{i}\omega\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}/2\right)\ ,\qquad R(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)=\exp\left(-\mathrm{i}\omega\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\vec{T}\right)$$

T_1, T_2 和 T_3 由式 (4.11) 和 (4.12) 给出. 进一步根据 $u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$ 和 $R(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$ 的这一对应关系, 证明 $\mathrm{SO}(3)\sim\mathrm{SU}(2)$.

2. 把上式的 $R(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)=\exp\left(-\mathrm{i}\omega\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\vec{T}\right)$ 展开成有限项矩阵之和.

提示: $T_a^3=T_a$.

3. 把 SO(3) 群的不可约表示 D^3 关于子群 D_3 的分导表示, 按子群不可约表示约化, 找出约化的相似变换矩阵.

4. 计算 SO(3) 群的不可约表示 D^{18} 关于正二十面体固有点群 I 的分导表示按子群 I 不可约表示约化的克莱布施 – 戈登级数.

5. 分别计算 SO(3) 群的不可约表示 D^1, D^2 和 D^3 关于正二十面体固有点群 I 的分导表示, 按子群 I 不可约表示 (见附录 6) 约化的相似变换矩阵, 并由 I 群的元素在 D^1 表示中的表示矩阵, 计算 I 群各二次轴、三次轴和五次轴方向的极角 [即计算式 (2.26) 中的 θ_1 至 θ_5].

6. 证明在 SU(2) 群中, 相同 ω 的元素 $u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$ 互相共轭, 构成一类.

7. 试由球函数 $\mathrm{Y}_m^\ell(\hat{\boldsymbol{n}})$($\ell$ 固定) 线性组合出轨道角动量沿 $\hat{\boldsymbol{m}}=(\vec{e}_1-\vec{e}_2)/\sqrt{2}$ 方向的本征值为 m 的本征函数.

8. 设函数 $\psi_m^\ell(x)$ 是属于 SO(3) 群不可约表示 D^ℓ m 行的函数, 试由 $\psi_m^\ell(x)^*$ 线性组合出轨道角动量沿 $\vec{e}_2$ 方向的本征值为 m 的本征函数.

提示: 先利用式 (4.82).

9. 分别计算下列转动变换矩阵 R 的欧拉角

1) $R(\alpha,\beta,\gamma)=\dfrac{1}{4}\begin{pmatrix}-\sqrt{3}-2 & \sqrt{3}-2 & -\sqrt{2}\\ \sqrt{3}-2 & -\sqrt{3}-2 & \sqrt{2}\\ -\sqrt{2} & \sqrt{2} & 2\sqrt{3}\end{pmatrix}$,

2) $R(\alpha,\beta,\gamma)=\dfrac{1}{8}\begin{pmatrix}\sqrt{6}+2\sqrt{3} & 3\sqrt{2}-2 & 2\sqrt{6}\\ \sqrt{2}-6 & \sqrt{6}+2\sqrt{3} & 2\sqrt{2}\\ -2\sqrt{2} & -2\sqrt{6} & 4\sqrt{2}\end{pmatrix}$,

3) $R(\alpha,\beta,\gamma)=\dfrac{1}{2}\begin{pmatrix}\sqrt{3} & 1 & 0\\ 1 & -\sqrt{3} & 0\\ 0 & 0 & -2\end{pmatrix}$.

10. 分别计算下列转动变换 $R(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$ 的欧拉角

(1) $R[(\vec{e}_1\sin\theta+\vec{e}_3\cos\theta),\pi]$, (2) $R[(\vec{e}_1+\vec{e}_2+\vec{e}_3)/\sqrt{3},2\pi/3]$,

(3) $R[(\vec{e}_1\sin\theta+\vec{e}_2\cos\theta),\pi]$.

11. 试用 SU(2) 群的表示矩阵 $D^j(\vec{e}_3,\omega)$ 和 $d^j(\omega)$ 表出绕 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向转动 ω 元素的表示矩阵 $D^j(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$.

12. 试计算 $\left\{d^{\ell}(\theta)\left(I_3^{\ell}\right)^2 d^{\ell}(\theta)^{-1}\right\}_{mm}$, 其中 $d^{\ell}(\theta)$ 是转动群的表示矩阵, I_3^{ℓ} 是该表示的第三个生成元.

提示: 利用伴随表示的性质.

13. 对任何一阶李群, 组合函数为 $f(r,s)$, 试选择新参数 r', 使新的组合函数为相加关系, $f'(r',s')=r'+s'$. 沿 x_3 方向相对速度为 v 的两惯性系间的洛伦兹变换 $A(v)$ 取如下形式, 它的集合构成一阶李群

$$A(v)=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma & -\mathrm{i}\gamma v/c \\ 0 & 0 & \mathrm{i}\gamma v/c & \gamma \end{pmatrix}, \qquad \begin{aligned} &\gamma=\left(1-v^2/c^2\right)^{-1/2}, \\ &f(v_1,v_2)=\frac{v_1+v_2}{1+v_1v_2/c^2}. \end{aligned}$$

请选择新参数, 使新的组合函数为相加关系.

14. 试用克莱布施 – 戈登系数计算三个电子系统总自旋角动量本征函数.

15. 利用 SO(3) 群和 SU(2) 群的同态关系, 验算 O 群元素的乘积公式: $T_zR_1=S_3$, $T_zT_x=R_1$ 和 $R_1R_2=R_3^2$.

第五章　晶体的对称性

晶体对称性的研究是群论方法在物理中应用的一个典型的例子. 仅仅根据晶体具有平移不变性, 通过系统的群论研究, 就可以对晶体进行分类, 计算出晶体可能有的 11 种固有点群, 32 种点群, 7 种晶系, 14 种布拉菲 (Bravais) 格子, 73 种简单空间群和 230 种空间群. 本章将从群论的角度研究晶体的对称变换群及其表示, 系统研究晶体的分类.

5.1　晶体的对称变换群

晶体的基本特征就是组成晶体的原子在三维空间有周期性的排列, 这种周期性的规则排列称为晶格. 晶格对三维空间一定的平移变换保持不变

$$\vec{r} \longrightarrow \vec{r'} = T(\vec{\ell})\vec{r} = \vec{r} + \vec{\ell} \tag{5.1}$$

这样的平移矢量 $\vec{\ell}$ 称为晶格矢量. 晶格最小的周期单元称为晶格的原胞, 它的不共面的三条棱可选为描述晶格的基本矢量, 称为晶格基矢 $\vec{a}_i$. 如果晶格矢量都可表为晶格基矢的整数线性组合, 这样的晶格基矢称为原始的 (primitive). 除非特别声明, 我们约定所选取的晶格基矢都是原始的

$$\vec{\ell} = \vec{a}_1\ell_1 + \vec{a}_2\ell_2 + \vec{a}_3\ell_3 = \sum_{i=1}^{3} \vec{a}_i\ell_i, \qquad \ell_i \text{ 是整数} \tag{5.2}$$

选定了晶格基矢, 晶格矢量可以用三个整数 ℓ_i 来描写. 保持晶体不变的平移变换 $T(\vec{\ell})$ 的集合构成群, 称为晶体的平移群, 简称平移群, 记作 $\mathcal{T}$.

除了平移不变性外, 晶体往往还有平移、转动和反演的协同变换的不变性, 这些对称变换在晶体理论里称为晶体的对称操作, 一般记作 $g(R,\vec{\alpha})$

$$\vec{r} \longrightarrow \vec{r'} = g(R,\vec{\alpha})\vec{r} = R\vec{r} + \vec{\alpha}\ , \qquad \vec{\alpha} = \sum_{i=1}^{3} \vec{a}_i\alpha_i \tag{5.3}$$

其中, R 是三维实正交变换, 包括固有转动和非固有转动, 它保持原点不变, α_i 是实常数, 描写原点的平移. 如果 $\vec{\alpha} = 0$, 则 $g(R,0) = R$ 是固有或非固有转动变换. 当 $R = E$ 时, α_i 必须取整数 ℓ_i, $g(E,\vec{\ell}) = T(\vec{\ell})$ 是平移变换. 对称变换的乘积定义为相继做两次对称变换

$$g(R,\vec{\alpha})g(R',\vec{\beta})\vec{r} = g(R,\vec{\alpha})\left\{R'\vec{r} + \vec{\beta}\right\} = RR'\vec{r} + \vec{\alpha} + R\vec{\beta}$$

$$g(R,\vec{\alpha})g(R',\vec{\beta}) = g(RR',\vec{\alpha}+R\vec{\beta}) \tag{5.4}$$

$$g(R,\vec{\alpha})^{-1} = g(R^{-1},-R^{-1}\vec{\alpha}) \tag{5.5}$$

在乘积中, 转动部分做通常的转动乘积, 但平移部分不是简单相加, 它受到转动变换的影响. 正因为参加协同变换的平移部分对转动变换的乘积没有影响, 所以对于给定的晶体, 在它的对称变换 $g(R,\vec{\alpha})$ 中出现的所有实正交变换 R 的集合构成群, 称为晶格点群, 简称点群, 记作 G.

晶体对称变换的集合构成晶体对称群, 称为空间群, 记作 $\mathcal{S}$. 平移群 $\mathcal{T}$ 是空间群 $\mathcal{S}$ 的子群, 而且是不变子群, 因为平移变换的共轭元素仍是平移变换

$$\begin{gathered} g(R,\vec{\alpha})T(\vec{\ell})g(R,\vec{\alpha})^{-1} = g\left(E,\vec{\alpha}+R(\vec{\ell}-R^{-1}\vec{\alpha})\right) = T(R\vec{\ell}) \ , \\ R\vec{\ell} = \vec{\ell'} \end{gathered} \tag{5.6}$$

设 ℓ_i 是 α_i 中的整数部分, 则

$$\begin{aligned} &\alpha_i = \ell_i + t_i \ , \qquad 0 \leqslant t_i < 1 \ , \\ &g(R,\vec{\alpha}) = T(\vec{\ell})g(R,\vec{t}) \end{aligned} \tag{5.7}$$

可以证明, 对于给定的晶体和选定的晶格基矢, 在对称变换中, 每一个 R 只能对应一个 $\vec{t}$. 用反证法. 设 $g(R,\vec{t})$ 和 $g(R,\vec{t'})$ 都是晶体的对称变换, 则

$$\begin{gathered} g(R,\vec{t})^{-1}g(R,\vec{t'}) = T(-R^{-1}\vec{t}+R^{-1}\vec{t'}) = T(\vec{\ell}) \ , \\ \vec{t'}-\vec{t} = R\vec{\ell} = \vec{\ell'} \end{gathered}$$

由于式 (5.7) 对 $\vec{t}$ 的限制, 只能 $\vec{t'}=\vec{t}$. 证完.

式 (5.7) 是平移群陪集的一般形式, 它给出平移群陪集与点群元素 R 间的一个一一对应关系, 平移群和恒元 E 对应, 由式 (5.4) 和 (5.5), 这种对应关系对它们的乘积保持不变, 因而平移群的商群 $\mathcal{S}/\mathcal{T}$ 同构于点群 G

$$\mathcal{S}/\mathcal{T} \approx G \tag{5.8}$$

注意, R 不一定是晶体的对称变换, 点群一般也不是空间群的子群. 若 $g(R,\vec{t})$ 中的矢量 $\vec{t}=0$, R 才是晶体的对称变换, 只有当点群所有元素对应的矢量 $\vec{t}$ 都是零时, 点群才是空间群的子群. 这样的空间群称为简单空间群 (symmorphic space group). 由于平移不变性的存在, 按照式 (5.6), 晶格点群受到很大的限制, 对于给定的晶格点群, 式 (5.6) 又使晶格基矢的方向和大小受到限制, 从而决定晶体的可能晶系和布拉非格子, 决定晶体可能的空间群. 这就是晶体的周期性排列决定晶体分类的基本思想.

5.2 晶格点群

本节研究平移不变性对点群元素 R 的限制, 从而确定晶体可能有的全部晶格点群.

一、点群元素 R 的可能形式

先介绍晶体理论中对实正交变换 R 常用的描写方式. 以前我们常在正交归一的基 $\vec{e}_a$ 中描写实正交变换, 在此基中实正交变换的矩阵形式是实正交矩阵. 在这一章里, 为了与以晶格基矢为基时变换的矩阵形式相区别, 这实正交矩阵记作 $\overline{D}(R)$

$$\vec{e}_a \cdot \vec{e}_b = \delta_{ab} , \qquad R\vec{e}_a = \sum_{b=1}^{3} \vec{e}_b \overline{D}_{ba}(R) \tag{5.9}$$

在晶体理论中, 晶格基矢 $\vec{a}_i$ 处于特殊的地位, 因为晶格矢量都是晶格基矢的整数线性组合. 取晶格基矢作为基会给计算带来很多方便, 当然晶格基矢的不正交归一性也会造成一些困难, 需要设法予以弥补. 弥补的方法就是引入倒晶格基矢 $\vec{b}_i$. 设

$$\vec{a}_i = \sum_{d=1}^{3} \vec{e}_d X_{di} , \qquad \det X \neq 0 \tag{5.10}$$

由于晶格基矢一般不是正交归一的, X 矩阵是实矩阵, 但一般不是实正交矩阵. 定义倒晶格基矢 $\vec{b}_i$

$$\vec{b}_i = \sum_{a=1}^{3} \left(X^{-1}\right)_{ia} \vec{e}_a , \qquad \vec{e}_a = \sum_{i=1}^{3} X_{ai} \vec{b}_i \tag{5.11}$$

则

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = \vec{a}_j \cdot \vec{b}_i = \delta_{ij} \tag{5.12}$$

在这一章里, 我们很少用正交归一的基 $\vec{e}_a$, 而用晶格基矢 $\vec{a}_i$ 为基. 在基 $\vec{a}_i$ 中, 实正交变换 R 的矩阵形式 R_{ij} 一般不再是实正交矩阵

$$R\vec{a}_j = \sum_{i=1}^{3} \vec{a}_i D_{ij}(R) , \qquad D(R) = X^{-1} \overline{D}(R) X$$

$$\begin{aligned} R\vec{b}_i &= \sum_{d=1}^{3} \left(X^{-1}\right)_{id} R\vec{e}_d = \sum_{dc} \left(X^{-1}\right)_{id} \vec{e}_c \overline{D}_{cd}(R) \\ &= \sum_{j} \left\{ \sum_{dc} \left(X^{-1}\right)_{id} \left[\overline{D}(R)^{-1}\right]_{dc} X_{cj} \right\} \vec{b}_j = \sum_{j=1}^{3} \left[\overline{D}(R)^{-1}\right]_{ij} \vec{b}_j \end{aligned}$$

$$D_{ij}(R) = \vec{b}_i \cdot R\vec{a}_j = \vec{a}_j \cdot R^{-1} \vec{b}_i \tag{5.13}$$

在晶体理论中常用并矢来代替矩阵形式. 所谓并矢可以直观地理解为两个矢量并在一起, 两矢量分别称为左矢和右矢. 每个矢量都可以独立地做矢量运算. 并矢用上面带两个箭头的符号标记. 写在并矢左面或右面的矢量运算, 分别是和并矢的左矢或右矢进行运算的. 并矢与矢量做叉乘运算后仍是并矢, 与矢量做点乘运算后变成矢量, 并矢与并矢做点乘运算后仍是并矢. 实正交变换 R 的并矢为

$$\begin{aligned} \vec{\vec{R}} &= \sum_{ij} D_{ij}(R)\vec{a}_i\vec{b}_j = \sum_{ij} \left[D(R)^{-1}\right]_{ij} \vec{b}_j\vec{a}_i \\ D_{ij}(R) &= \vec{b}_i \cdot \vec{\vec{R}} \cdot \vec{a}_j = \vec{a}_j \cdot \vec{\vec{R}}^{-1} \cdot \vec{b}_i \end{aligned} \tag{5.14}$$

恒等变换的并矢是

$$\vec{\vec{1}} = \sum_j \vec{a}_j\vec{b}_j = \sum_j \vec{b}_j\vec{a}_j \tag{5.15}$$

空间反演 σ 的并矢添一负号. 容易验算, 绕空间 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向转动 ω 角的变换 $R(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$ 的并矢形式为

$$\vec{\vec{R}}(\hat{\boldsymbol{n}},\omega) = \hat{\boldsymbol{n}}\hat{\boldsymbol{n}} + \left(\vec{\vec{1}} - \hat{\boldsymbol{n}}\hat{\boldsymbol{n}}\right)\cos\omega + \left(\vec{\vec{1}} \times \hat{\boldsymbol{n}}\right)\sin\omega \tag{5.16}$$

$\hat{\boldsymbol{n}}\hat{\boldsymbol{n}}$ 是沿 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向的投影算符, $\left(\vec{\vec{1}} - \hat{\boldsymbol{n}}\hat{\boldsymbol{n}}\right)$ 是垂直 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向的投影算符.

现在讨论平移不变性对点群元素 R 的限制. 式 (5.6) 指出, 晶格矢量经变换 R 后必须仍是晶格矢量, 因而晶格基矢经变换 R 后是晶格基矢的整数线性组合, 即 R 的矩阵元素 $D_{ij}(R)$ 全是整数, 矩阵迹也是整数. 实正交变换在任何基中的矩阵迹都可用转动角度 ω 表出

$$\pm(1 + 2\cos\omega) = \text{整数} \tag{5.17}$$

其中, 正号对应固有转动, 负号对应非固有转动. 因为矩阵迹取整数, 所以 $\cos\omega$ 是半整数, 即等于 0, $\pm 1/2$ 和 ± 1. 这样, 转动角度 ω 只能取

$$\omega = 2\pi m/N\ , \qquad N = 1,\ 2,\ 3,\ 4\ \text{或}\ 6\ , \qquad 0 \leqslant m < N \tag{5.18}$$

这就是说, 晶格点群元素只能是固有或非固有的 N 次轴转动, N 等于 1, 2, 3, 4 或 6.

倒晶格基矢的整数线性组合称为倒晶格矢量, 记作 $\vec{K}$. 倒晶格矢量和晶格矢量的点乘是整数. 由于矢量点乘后变成标量, 在实正交变换中保持不变. 取 R 为晶格点群的元素

$$\vec{b}_i \cdot R^{-1}\vec{a}_j = \left(R\vec{b}_i\right) \cdot \vec{a}_j = \text{整数}$$

则 $R\vec{b}_i$ 仍是倒晶格矢量, R 在倒晶格基矢中的矩阵元素 $\left[D(R)^{-1}\right]_{ij}$ 也都是整数, 或者说

$$R\vec{K} = \vec{K}' \tag{5.19}$$

在晶格空间和倒晶格空间, 晶格点群是相同的.

二、晶体的固有点群

首先, 如果固有点群只包含一个固有转动轴, 则它是循环群. 这样的固有点群只有五种, 按熊夫利 (Schoenflies) 符号记作 C_N, $N=1, 2, 3, 4$ 和 6. 按点群的国际符号, 它们就用数 N 标记. 通常把转动轴取为 x_3 轴. C_N 群是阿贝尔群, 含 N 个元素, 有一个生成元 C_N, 它是绕 x_3 轴转动 $2\pi/N$ 角的变换, 并矢记作 $\vec{\vec{C}}_N$. 群中其他元素是它的幂次. C_N 群有 N 个一维不可约表示, 生成元的表示矩阵为

$$D^m\left(C_N\right)=\exp\left(-\mathrm{i}2\pi m/N\right)\ , \qquad 0\leqslant m<N$$

其中, m 标记不等价的不可约表示.

其次, 我们研究包含两个或两个以上转动轴的点群, 先研究转动轴数量上的限制. 设固有点群 G 包含 n_2 个二次轴, n_3 个三次轴, n_4 个四次轴和 n_6 个六次轴, 这些转动轴对应的转动, 除恒元外没有公共元素, 因而点群 G 包含的元素数目为

$$g=1+n_2+2n_3+3n_4+5n_6 \tag{5.20}$$

对每个 N 次轴, 循环群元素之和的并矢记作 $\{\vec{\vec{C}}_N\}$, 显然, 它作用在 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 上得 $N\hat{\boldsymbol{n}}$, 而作用在垂直 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 的矢量上得零, 因而 $\{\vec{\vec{C}}_N\}$ 正比于 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向的投影算符

$$\{\vec{\vec{C}}_N\}=N\hat{\boldsymbol{n}}\hat{\boldsymbol{n}}$$

在包含 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 在内的一组正交归一的矢量基中, 容易算得这算符矩阵形式的矩阵迹为 N. 扣除恒元的矩阵迹为 3, 其余元素之和的矩阵迹为 $N-3$. 这样, 点群全部元素之和对应的矩阵, 矩阵迹为

$$3+(2-3)n_2+(3-3)n_3+(4-3)n_4+(6-3)n_6=3-n_2+n_4+3n_6$$

另一方面, 根据重排定理, 点群全部元素之和作用在任何非零矢量 $\vec{r}$ 上满足

$$S\left\{\sum_{R\in G}R\vec{r}\right\}=\left\{\sum_{R\in G}R\vec{r}\right\}$$

即括号内的矢量在点群任意元素 S 作用下保持不变. 只要点群 G 包含有两个不同方向的转动轴, 这样的矢量只能是零矢量, 因而对这样的点群, 全部元素之和对应零矩阵

$$3-n_2+n_4+3n_6=0 \tag{5.21}$$

这条件限制了点群 G 包含的转动轴数目.

现在我们具体研究包含两个以上转动轴的固有点群. 讨论中必须计算绕不同轴转动元素的乘积问题. 若按三维转动矩阵相乘, 计算太复杂. 利用 SO(3) 群和 SU(2)

群同态关系, 计算相应 SU(2) 群元素的乘积, 计算量就会大大减少. 由于 $\pm u$ 对应同一个转动变换, 对于 u 矩阵及其乘积的符号不必在意. 我们用到的基本公式是

$$\begin{aligned} &u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)=\mathbf{1}\cos(\omega/2)-\mathrm{i}\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})\sin(\omega/2) \\ &\cos(\omega/2)=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,\{u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)\} \\ &(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}_1)\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}_2)=\mathbf{1}\,(\hat{\boldsymbol{n}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{n}}_2)+\mathrm{i}\vec{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{n}}_1\times\hat{\boldsymbol{n}}_2) \end{aligned} \tag{5.22}$$

因为允许的只有二、三、四和六次轴, 所以 $\cos(\omega/2)$ 只能取如下允许值

$$\cos(\omega/2)=0\ ,\quad \pm\frac{1}{2},\quad \pm\frac{1}{\sqrt{2}},\quad \pm\frac{\sqrt{3}}{2}\ ,\quad \pm 1 \tag{5.23}$$

首先, 若群 G 不包含高于二次的转动轴, 则由式 (5.21) 得 $n_2=3$. 二次轴转动对应的 u 矩阵为

$$\begin{aligned} u(\hat{\boldsymbol{n}},\pi)&=-\mathrm{i}\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}) \\ u(\hat{\boldsymbol{n}}_1,\pi)u(\hat{\boldsymbol{n}}_2,\pi)&=-\mathbf{1}\,(\hat{\boldsymbol{n}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{n}}_2)-\mathrm{i}\vec{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{n}}_1\times\hat{\boldsymbol{n}}_2) \end{aligned} \tag{5.24}$$

既然乘积元素仍是二次轴转动, 则

$$\hat{\boldsymbol{n}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{n}}_2=0\ ,\qquad \hat{\boldsymbol{n}}_3=\hat{\boldsymbol{n}}_1\times\hat{\boldsymbol{n}}_2$$

三个二次轴互相垂直. 这点群正是 D_2 群, 它是阿贝尔群, 同构于四阶反演群 V_4, 乘法表见表 2.3, 特征标表见表 3.6.

其次, 讨论点群只含有一个高于二次的转动轴, 设为 N 次轴, 称为主轴. 通常把主轴方向取为 x_3 轴. 点群中的其他转动元素只能使主轴反向, 因而只能是轴向与主轴垂直的二次轴转动. 由式 (5.21) 知, 二次轴的数目正好等于高次轴的次数 N. 由式 (5.24) 知, 相邻两二次轴转动的乘积是 N 次轴转动, 因而相邻两二次轴的夹角为 π/N. 此群正是 D_N 群, $N=3$, 4 和 6. D_N 群包含 $2N$ 个元素, 乘积规则见式 (2.12), 特征标表见表 3.7, 3.12 和 3.13. D_N 群元素都可表为两个子群元素的乘积: $\mathrm{C}_N\mathrm{C}_2'$, 其中 C_2' 是沿 x_1 轴方向的二次轴转动群. D_N 群的国际符号为 $N2'$.

第三, 设 G 包含两个以上三次转动轴, 但不含高于三次的转动轴. 三次轴转动对应的 u 矩阵为

$$u(\hat{\boldsymbol{n}},\pm 2\pi/3)=\mathbf{1}/2\mp\mathrm{i}\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})\,\sqrt{3}/2$$

对两个不同轴向的三次轴转动的乘积, 乘积元素转角之半的余弦为

$$\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,\{u(\hat{\boldsymbol{n}}_1,\pm 2\pi/3)u(\hat{\boldsymbol{n}}_2,2\pi/3)\}=1/4\mp 3\,(\hat{\boldsymbol{n}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{n}}_2)\,/4 \tag{5.25}$$

要使这些取值都在式 (5.23) 给出的范围内, 允许的解只有 $\hat{\boldsymbol{n}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{n}}_2=\pm 1/3$. 由于一个轴反向使矢量点乘改号, 不失普遍性, 可取

$$\hat{\boldsymbol{n}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{n}}_2=\cos\theta=-1/3\ ,\qquad \theta=109^\circ 28' \tag{5.26}$$

由三次轴转动的乘积, 可得四个对称分布的等价的三次转动轴, $n_3 = 4$. 三次轴是极性轴, 相邻三次轴的夹角为 θ. 由式 (5.21) 得 $n_2 = 3$, 三个二次轴只能沿两个相邻三次轴的角平分线方向, 互相等价. 相邻二次轴与三次轴的夹角余弦为 $1/\sqrt{3}$. 事实上

$$u(\hat{\boldsymbol{n}}_1, -2\pi/3)u(\hat{\boldsymbol{n}}_2, 2\pi/3) = \mathrm{i}\vec{\sigma} \cdot \left(\sqrt{3}\hat{\boldsymbol{n}}_1 - \sqrt{3}\hat{\boldsymbol{n}}_2 + 3\hat{\boldsymbol{n}}_1 \times \hat{\boldsymbol{n}}_2\right)/4,$$
$$\hat{\boldsymbol{n}}_1 \cdot \left(\sqrt{3}\hat{\boldsymbol{n}}_1 - \sqrt{3}\hat{\boldsymbol{n}}_2 + 3\hat{\boldsymbol{n}}_1 \times \hat{\boldsymbol{n}}_2\right)/4 = 1/\sqrt{3}$$

通常让三个二次轴沿坐标轴方向, 四个三次轴沿如下四个方向

$$\left(\vec{e}_1 \pm \vec{e}_2 \pm \vec{e}_3\right)/\sqrt{3} \qquad 和 \quad \left(-\vec{e}_1 \pm \vec{e}_2 \mp \vec{e}_3\right)/\sqrt{3}$$

这固有点群就是正四面体对称群 T, 它的乘法表见表 2.9, 特征标表见表 3.8. T 群元素都可表为三个子群元素的乘积, $\mathrm{C}_3'\mathrm{C}_2\mathrm{C}_2'$. T 群的国际符号为 $3'22'$.

最后, 一般地讨论包含两个以上高于二次转动轴的点群. 高次轴次数至少是三, 它会使另一个高次轴至少有三个互相等价的轴. 点群显然不能包含两个以上六次轴, 因为六次轴同时又是三次轴和二次轴, 三次轴间的夹角必须是 $109°28'$, 而若两个二次轴以此为夹角, 它们元素乘积的转角就不满足式 (5.23) 的条件. 因此剩下的可能点群必须不含六次轴, 只能是包含两个以上四次转动轴的点群. 四次转动对应的 u 矩阵为

$$u(\hat{\boldsymbol{n}}, \pm\pi/2) = \mathbf{1}/\sqrt{2} \mp \mathrm{i}\left(\vec{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}\right)/\sqrt{2},$$
$$u(\hat{\boldsymbol{n}}, \pi) = -\mathrm{i}\left(\vec{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}\right)$$

对两个不同轴向的四次轴转动的乘积, 乘积元素转角之半的余弦为

$$\mathrm{Tr}\left\{u(\hat{\boldsymbol{n}}_1, \pm\pi/2)u(\hat{\boldsymbol{n}}_2, \pi/2)\right\}/2 = 1/2 \mp \left(\hat{\boldsymbol{n}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{n}}_2\right)/2,$$
$$\mathrm{Tr}\left\{u(\hat{\mathbf{n}}_1, \pi)u(\hat{\boldsymbol{n}}_2, \pi/2)\right\}/2 = -\left(\hat{\boldsymbol{n}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{n}}_2\right)/\sqrt{2}$$

要使上式的余弦值都满足式 (5.23) 的条件, 只有 $\hat{\boldsymbol{n}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{n}}_2 = 0$, 即四次轴互相垂直. 由于四次轴的转动, 三个四次轴是双向的和互相等价的. 两个轴向垂直的四次轴转动的乘积会产生三次轴转动和二次轴转动

$$u(\hat{\boldsymbol{n}}_1, \pi/2)u(\hat{\boldsymbol{n}}_2, \pi/2) = \mathbf{1}/2 - \mathrm{i}\vec{\sigma} \cdot \left(\hat{\boldsymbol{n}}_1 + \hat{\boldsymbol{n}}_2 + \hat{\boldsymbol{n}}_1 \times \hat{\boldsymbol{n}}_2\right)/2,$$
$$\hat{\boldsymbol{n}}_1 \cdot \left(\hat{\boldsymbol{n}}_1 + \hat{\boldsymbol{n}}_2 + \hat{\boldsymbol{n}}_1 \times \hat{\boldsymbol{n}}_2\right)/\sqrt{3} = 1/\sqrt{3}$$

三次轴和四次轴的相对位置正好与 T 群中三次轴和二次轴的相对位置一样. 现在四个等价的三次轴都是双向轴. 让这三个四次轴沿坐标轴方向, 四个三次轴仍与 T 群中的三次轴一样取向. 由

$$u(\hat{\boldsymbol{n}}_1, \pi)u(\hat{\boldsymbol{n}}_2, \pi/2) = -\vec{\sigma} \cdot \left(\hat{\boldsymbol{n}}_1 + \hat{\boldsymbol{n}}_1 \times \hat{\boldsymbol{n}}_2\right)/\sqrt{2}$$

可见这二次轴与 $\hat{\boldsymbol{n}}_2$ 垂直, 但与 $\hat{\boldsymbol{n}}_1$ 和 $\hat{\boldsymbol{n}}_1 \times \hat{\boldsymbol{n}}_2$ 都成 $\pi/4$ 角. 由四次轴转动, 得六个等价的二次轴, 分布在各坐标平面上坐标轴的角平分线方向. 二次轴都处在相邻的四次轴和相邻的三次轴的角平分线方向. 这些转动轴个数满足条件 (5.21). 这固有点群就是立方体对称群 O, 它的乘法表见表 2.9 和 2.11, 特征标表见表 3.9. O 群元素都可表为三个子群元素的乘积, $\mathrm{C}_3'\mathrm{C}_4\mathrm{C}_2''$. O 群的国际符号为 $3'42''$.

这样, 可能的晶格固有点群共有 11 个, 它们的结构列于表 5.1. 在晶体理论中, 沿 $\vec{a}_3$ 方向的转动轴用不带撇的符号标记, 不沿 $\vec{a}_3$ 方向的高于二次的转动轴和沿 $\vec{a}_1$ 方向的二次转动轴, 用带一撇的符号标记, 沿其他方向的二次转动轴用带两撇的符号标记.

表 5.1 晶格固有点群的结构

点群	阶	类数	包含各次转动轴个数				不等价不可约表示个数			分解为循环点群的乘积	生成元	指数为 2 的不变子群
			2	3	4	6	一维	二维	三维			
C_1	1	1					1			C_1	C_1	
C_2	2	2	1				2			C_2	C_2	C_1
C_3	3	3		1			3			C_3	C_3	
C_4	4	4			1		4			C_4	C_4	C_2
C_6	6	6				1	6			C_6	C_6	C_3
D_2	4	4	3				4			$\mathrm{C}_2\mathrm{C}_2'$	C_2, C_2'	C_2
D_3	6	3	3	1			2	1		$\mathrm{C}_3\mathrm{C}_2'$	C_3, C_2'	C_3
D_4	8	5	4		1		4	1		$\mathrm{C}_4\mathrm{C}_2'$	C_4, C_2'	$\mathrm{C}_4,\mathrm{D}_2$
D_6	12	6	6			1	4	2		$\mathrm{C}_6\mathrm{C}_2'$	C_6, C_2'	$\mathrm{C}_6,\mathrm{D}_3$
T	12	4	3	4			3		1	$\mathrm{C}_3'\mathrm{C}_2\mathrm{C}_2'$	C_3', C_2	
O	24	5	6	4	3		2	1	2	$\mathrm{C}_3'\mathrm{C}_4\mathrm{C}_2''$	C_3', C_4	T

三、晶体的非固有点群

在 2.6 节, 我们已讨论过由固有点群 G 找非固有点群的一般方法. 有两种非固有点群. 一种是 I 型非固有点群, 它等于固有点群 G 和二阶反演群 C_i 的直乘, C_i 包含恒元和空间反演变换 σ. 晶体共有 11 种 I 型非固有点群, 它们的命名规则已在第二章介绍过 (见 2.6 节).

$$
\begin{array}{lll}
\mathrm{C}_i\ , & \mathrm{C}_{2h} = \mathrm{C}_2 \otimes \mathrm{C}_i & \mathrm{C}_{3i} = \mathrm{C}_3 \otimes \mathrm{C}_i \\
\mathrm{C}_{4h} = \mathrm{C}_4 \otimes \mathrm{C}_i\ , & \mathrm{C}_{6h} = \mathrm{C}_6 \otimes \mathrm{C}_i\ , & \mathrm{D}_{2h} = \mathrm{D}_2 \otimes \mathrm{C}_i \\
\mathrm{D}_{3d} = \mathrm{D}_3 \otimes \mathrm{C}_i\ , & \mathrm{D}_{4h} = \mathrm{D}_4 \otimes \mathrm{C}_i\ , & \mathrm{D}_{6h} = \mathrm{D}_6 \otimes \mathrm{C}_i \\
\mathrm{T}_h = \mathrm{T} \otimes \mathrm{C}_i\ , & \mathrm{O}_h = \mathrm{O} \otimes \mathrm{C}_i &
\end{array}
\qquad (5.27\mathrm{a})
$$

另一种是 P 型非固有点群. 如果固有点群 G 包含指数为 2 的不变子群 H, 保

持子群 H 元素不变, 把陪集元素都乘以空间反演 σ, 就得到相应的 P 型非固有点群. 表 5.1 已列出晶体固有点群所包含的指数为 2 的不变子群, 由此可得晶体的如下 10 种 P 型非固有点群

$$\begin{array}{llll} \mathrm{C}_s \approx \mathrm{C}_2\ , & \mathrm{S}_4 \approx \mathrm{C}_4\ , & \mathrm{C}_{3h} \approx \mathrm{C}_6\ , & \mathrm{C}_{2v} \approx \mathrm{D}_2 \\ \mathrm{C}_{3v} \approx \mathrm{D}_3\ , & \mathrm{C}_{4v} \approx \mathrm{D}_{2d} \approx \mathrm{D}_4\ , & \mathrm{C}_{6v} \approx \mathrm{D}_{3h} \approx \mathrm{D}_6\ , & \mathrm{T}_d \approx \mathrm{O} \end{array} \tag{5.27b}$$

32 种晶格点群的主要性质列于表 5.2.

表 5.2　晶格点群

固有点群			非固有点群			
点群	分解为循子群的乘积	指数为 2 的不变子群	P 型 (不含 σ) 点群	P 型 (不含 σ) 循环群乘积	I 型 (含 σ) 点群	I 型 (含 σ) 循环群乘积
C_1	C_1				C_i	C_i
C_2	C_2	C_1	C_s	C_s	C_{2h}	$\mathrm{C}_i\mathrm{C}_2$
C_3	C_3				C_{3i}	C_{3i}
C_4	C_4	C_2	S_4	S_4	C_{4h}	$\mathrm{C}_i\mathrm{C}_4$
C_6	C_6	C_3	C_{3h}	C_{3h}	C_{6h}	$\mathrm{C}_i\mathrm{C}_6$
D_2	$\mathrm{C}_2\mathrm{C}_2'$	C_2	C_{2v}	$\mathrm{C}_2\mathrm{C}_s'$	D_{2h}	$\mathrm{C}_i\mathrm{C}_2\mathrm{C}_2'$
D_3	$\mathrm{C}_3\mathrm{C}_2'$	C_3	C_{3v}	$\mathrm{C}_3\mathrm{C}_s'$	D_{3d}	$\mathrm{C}_{3i}\mathrm{C}_2'$
D_4	$\mathrm{C}_4\mathrm{C}_2'$	C_4	C_{4v}	$\mathrm{C}_4\mathrm{C}_s'$	D_{4h}	$\mathrm{C}_i\mathrm{C}_4\mathrm{C}_2'$
		D_2	D_{2d}	$\mathrm{S}_4\mathrm{C}_2'$		
D_6	$\mathrm{C}_6\mathrm{C}_2'$	C_6	C_{6v}	$\mathrm{C}_6\mathrm{C}_s'$	D_{6h}	$\mathrm{C}_i\mathrm{C}_6\mathrm{C}_2'$
		D_3	D_{3h}	$\mathrm{C}_{3h}\mathrm{C}_2'$		
T	$\mathrm{C}_3'\mathrm{C}_2\mathrm{C}_2'$				T_h	$\mathrm{C}_{3i}'\mathrm{C}_2\mathrm{C}_2'$
O	$\mathrm{C}_3'\mathrm{C}_4\mathrm{C}_2''$	T	T_d	$\mathrm{C}_3'\mathrm{S}_4\mathrm{C}_s''$	O_h	$\mathrm{C}_{3i}'\mathrm{C}_4\mathrm{C}_2''$

P 型非固有点群与相应的固有点群同构, 因而有相同的特征标表. I 型非固有点群是相应固有点群和二阶反演群的直乘, 不等价不可约表示也是两子群不等价不可约表示的直乘. 在晶体理论中, 对固有点群和非固有点群, 采用的不等价不可约表示的名称略有不同, 这里不再列举.

5.3　晶系和布拉菲格子

上节研究了平移不变性对晶格点群的限制, 现在研究晶格点群对晶格矢量的限制. 按晶格点群对晶格矢量的限制情况, 把晶体分为 7 种晶系, 在每种晶系中, 又根据晶格矢量的分布特征, 分为若干个布拉菲 (Bravais) 格子, 共有 14 种布拉菲格子. 本节先研究简单空间群的情况, 即晶格点群是空间群的子群, 点群元素是晶体的对称变换, 晶体的所有对称变换都可表为平移变换和点群元素的乘积. 下节再研究一般空间群的情况.

一、晶格矢量应满足的条件

式 (5.6) 和 (5.19) 是晶体平移不变性对晶格点群元素的限制，当晶格点群确定后，它又反过来对晶格矢量和倒晶格矢量做出限制

$$R\vec{\ell}=\vec{\ell}' , \qquad R\vec{K}=\vec{K}' \tag{5.28}$$

不同的点群给出的限制一般是不同的，但有些点群给出相似甚至相同的限制，例如空间反演变换 σ 在任何表象中都是常数矩阵 $(-\mathbf{1})$，对晶格基矢的选择没有限制，因而非固有点群与对应的固有点群，对晶格基矢的限制是相同的. 除了 $N=2$ 外，C_N 群和 D_N 群对晶格基矢的限制类似，T 群和 O 群对晶格基矢的限制相同. 根据这些限制条件，把晶体分为 7 种晶系:

(1) 三斜晶系 (triclinic)，对应点群 C_1 和 C_i.

(2) 单斜晶系 (monoclinic)，对应点群 C_2, C_s 和 C_{2h}.

(3) 正交晶系 (orthorhombic)，对应点群 D_2, C_{2v} 和 D_{2h}.

(4) 三方晶系 (trigonal)，对应点群 C_3, C_{3i}, D_3, C_{3v} 和 D_{3d}.

(5) 六方晶系 (hexagonal)，对应点群 C_6, C_{3h}, C_{6h}, D_6, C_{6v}, D_{3h} 和 D_{6h}.

(6) 四方晶系 (tetragonal)，对应点群 C_4, S_4, C_{4h}, D_4, C_{4v}, D_{2d} 和 D_{4h}.

(7) 立方晶系 (cubic)，对应点群 T, T_h, O, T_d 和 O_h.

在实际计算中发现，有一类三方晶系，点群对晶格基矢的限制和六方晶系相同，归入六方晶系，另一类称为菱方晶系 (rhombohedral).

以前我们选取的晶格基矢 $\vec{a}_i$ 是原始的，任何晶格矢量都可表为晶格基矢的整数线性组合. 现在为了对每一晶系，按照点群对晶格矢量的限制，用统一的方法引入晶格基矢，适当选取非原始的晶格基矢会更方便一些. 这里所谓的非原始的晶格基矢指，在基矢方向晶格基矢仍是最短的晶格矢量，它们的任何整数线性组合仍是晶格矢量，但是允许晶格基矢的某些特殊的分数组合 $\vec{f}$ 也是晶格矢量，晶体对平移 $\vec{f}$ 的变换也保持不变. 规定 $\vec{f}$ 的三个分量都取小于 1 的正分数或零

$$\vec{f}=\vec{a}_1f_1+\vec{a}_2f_2+\vec{a}_3f_3 , \qquad 0\leqslant f_i<1 \tag{5.29}$$

相应的平移变换记作 $T(\vec{f})\equiv T(f_1,f_2,f_3)$. 根据 $\vec{f}$ 的可能选择，把一个晶系区分为若干个布拉菲格子. 计算表明，这些 f_i 只能取 0 或 1/2. 保持晶体不变的所有平移变换的集合构成晶体的平移群 $\mathcal{T}$，而平移晶格基矢整数线性组合的平移变换集合构成平移群的不变子群，记作 $\mathcal{T}_\ell$，陪集由平移变换 $T(\vec{f})$ 描写.

根据 $T(\vec{f})$ 的形式，把平移群分成四种类型:

(1) 原始平移群 P (primitive)

$$\mathcal{T}=\mathcal{T}_\ell \tag{5.30}$$

菱方晶系的原始平移群专门记作 R.

(2) 体心平移群 I (body-centered)

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}_\ell \otimes \left\{E,\ T\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)\right\} . \tag{5.31}$$

(3) 底心平移群 A, B 和 C (base-centered)

$$\begin{aligned} \text{A}:\quad & \mathcal{T} = \mathcal{T}_\ell \otimes \left\{E,\ T\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)\right\} \\ \text{B}:\quad & \mathcal{T} = \mathcal{T}_\ell \otimes \left\{E,\ T\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)\right\} \\ \text{C}:\quad & \mathcal{T} = \mathcal{T}_\ell \otimes \left\{E,\ T\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)\right\} \end{aligned} \tag{5.32}$$

显然, 如果 A, B 和 C 三个底心平移群中, 有两个是晶体的对称变换, 则第三个也一定是晶体的对称变换, 此时的平移群变成面心平移群 F.

(4) 面心平移群 F (face-centered)

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}_\ell \otimes \left\{E,\ T\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right),T\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right),T\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)\right\}. \tag{5.33}$$

这些平移群与晶系结合起来, 形成 14 种晶格类型, 称为布拉菲格子. 这样的平移群和相应的点群结合, 形成 73 种简单空间群. 将布拉菲格子符号 P, R, I, A, B, C 和 F 冠在点群符号前面, 就得到简单空间群的符号.

点群的符号有若干种体系, 前面我们介绍的是熊夫利符号, 在点群范围内它是较方便和应用最广泛的一种符号. 但这种符号没有把点群明显地写成子群或生成元的乘积形式, 应用到空间群时就显得不太方便. 以后在符号上有多次改进, 引入点群国际符号, Mauguin-Hermann 符号和空间群国际符号等, 它们的对应关系见表 5.3. 在处理晶体的空间群问题时, 我们推荐使用空间群国际符号. 在空间群国际符号体系中, 直接用数字 N 表固有循环点群, 用上面带一横的数字 $\overline{N}$ 表非固有循环点群, 符号 $\pm$ 表二阶反演群 C_i. 不带撇的数字表此循环点群的转动轴沿 $\vec{a}_3$ 方向, 带一撇的数字表沿其他方向的高次转动轴或沿 $\vec{a}_1$ 方向的二次转动轴, 沿其他方向的二次转动轴用带两撇的数字表示. 然后按照点群分解为循环点群乘积的次序来排列这些数字. 对每个点群, 参加乘积的循环点群数目不超过三个. 将这些数字冠以布拉菲格子的符号后, 就得到简单空间群的国际符号. 对一般空间群, 再把不为零的矢量 $\vec{t}$ 注在数字的下标上. 从表 5.3 中看到, 有的点群 (如 D_3 等) 对应两种不同的空间群国际符号. 本节后面部分将对此做出解释.

在后面的讨论中, 晶格基矢记为 $\vec{a}_i$, 它们的长度记为 a_i, 用 α_1 表 $\vec{a}_2$ 和 $\vec{a}_3$ 的夹角, 下标取 1, 2, 3 循环. 由晶格点群对晶格矢量和倒晶格矢量的限制条件 (5.28), 可证如下重要性质.

表 5.3 晶格点群各种符号的对照

熊氏符号	点群国际符号	MH符号	空间群国际符号	熊氏符号	点群国际符号	MH符号	空间群国际符号
C_1	1	1	1	C_{3v}	$3m$	$31m$	$3\bar{2}''$
C_i	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$	D_{3d}	$\bar{3}m$	$\bar{3}\frac{2}{m}1$	$\bar{3}2'$
C_2	2	2	2	D_{3d}	$\bar{3}m$	$\bar{3}1\frac{2}{m}$	$\bar{3}2''$
C_s	m	m	$\bar{2}$	D_4	422	422	$42'$
C_{2h}	$2/m$	$2/m$	±2	C_{4v}	$4mm$	$4mm$	$4\bar{2}'$
C_3	3	3	3	D_{2d}	$\bar{4}2m$	$\bar{4}2m$	$\bar{4}2'$
C_{3i}	$\bar{3}$	$\bar{3}$	$\bar{3}$	D_{2d}	$\bar{4}2m$	$\bar{4}m2$	$\bar{4}2''$
C_4	4	4	4	D_{4h}	$4/mmm$	$\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$\pm42'$
S_4	$\bar{4}$	$\bar{4}$	$\bar{4}$	D_6	622	622	$62'$
C_{4h}	$4/m$	$4/m$	±4	C_{6v}	$6mm$	$6mm$	$6\bar{2}'$
C_6	6	6	6	D_{3h}	$\bar{6}m2$	$\bar{6}2m$	$\bar{6}2'$
C_{3h}	$\bar{6}$	$\bar{6}$	$\bar{6}$	D_{3h}	$\bar{6}m2$	$\bar{6}m2$	$\bar{6}2''$
C_{6h}	$6/m$	$6/m$	±6	D_{6h}	$6/mmm$	$\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$\pm62'$
D_2	222	222	$22'$	T	23	23	$3'22'$
C_{2v}	$2mm$	$2mm$	$2\bar{2}'$	T_h	$m3$	$\frac{2}{m}3$	$\bar{3}'22'$
D_{2h}	mmm	$\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$\pm22'$	O	432	432	$3'42''$
D_3	32	321	$32'$	T_d	$\bar{4}3m$	$\bar{4}3m$	$3'\bar{4}\bar{2}''$
D_3	32	312	$32''$	O_h	$m3m$	$\frac{4}{m}3\frac{2}{m}$	$\bar{3}'42''$
C_{3v}	$3m$	$3m1$	$3\bar{2}'$				

定理一 除一次轴外，沿晶体的晶格点群任一转动轴方向，必有晶格矢量和倒晶格矢量，在与转动轴垂直的平面内，至少有两个不共线的晶格矢量和有两个不共线的倒晶格矢量.

证明 容易检验，除一次轴外，所有循环点群都包含子群 C_2, C_s 或 C_3. 先设点群包含 C_2，任取晶格矢量 $\vec{\ell}$，则 $\vec{\ell}\pm C_2\vec{\ell}$ 也是晶格矢量. $\vec{\ell}+C_2\vec{\ell}$ 平行转动轴，$\vec{\ell}-C_2\vec{\ell}$ 垂直转动轴. 在这两个晶格矢量决定的平面外再找一个晶格矢量 $\vec{\ell'}$，则 $\vec{\ell'}-C_2\vec{\ell'}$ 垂直转动轴，且与 $\vec{\ell}-C_2\vec{\ell}$ 不共线. 若点群包含 C_s，证法相同. 若点群包含 C_3，则 $\vec{\ell}+C_3\vec{\ell}+C_3^2\vec{\ell}$ 平行转动轴，$\vec{\ell}-C_3\vec{\ell}$ 和 $\vec{\ell}-C_3^2\vec{\ell}$ 垂直转动轴，且不共线. 因为在晶格空间和倒晶格空间，晶格点群是相同的，所以对倒晶格矢量的证明方法完全相同. 证完.

下面我们对每一种晶系，先规定选择晶格基矢的标准方法，然后讨论作为晶格基矢非整数线性组合 $\vec{f}$ 的可能性. 根据条件式 (5.28)，限制 f_j 的可能选择，定出在这晶系中可能的布拉菲格子和简单空间群.

二、三斜晶系

三斜晶系对应点群 C_1 (1) 和 C_i ($\bar{1}$). 括号里的是国际符号. 恒等变换和空间反

演变换的矩阵形式是常数矩阵, 它们对晶格基矢的选择没有限制. 取不在同一平面的三个晶格矢量作为晶格基矢, 要求晶格基矢是原始的. 晶格基矢的长度和基矢间的夹角都没有限制, 平移群是原始的. 这样, 单斜晶系只有一种 P 型布拉菲格子, 两种简单空间群 $P1$ 和 $P\bar{1}$.

三、单斜晶系

单斜晶系对应点群 C_2 (2), C_s ($\bar{2}$) 和 C_{2h} (± 2). 这些晶格点群含一个二次转动轴. 取沿转动轴方向的最短晶格矢量为晶格基矢 $\vec{a}_3$, 在垂直转动轴平面内, 取两个不共线的最小晶格矢量为 $\vec{a}_1$ 和 $\vec{a}_2$, 并要求 $\vec{a}_1 \times \vec{a}_2$ 沿 $\vec{a}_3$ 正向. 这里所谓平面中的最小晶格矢量指, 在此平面内任何晶格矢量都是它们的整数线性组合, 并不要求它们是此平面内最短的晶格矢量. 按此方法选取的晶格基矢, 它们的长度没有限制, 夹角限制为

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \pi/2 \tag{5.34}$$

在这组晶格基矢中, 点群生成元的并矢形式和矩阵形式分别为

$$\vec{\vec{2}} = -\vec{a}_1\vec{b}_1 - \vec{a}_2\vec{b}_2 + \vec{a}_3\vec{b}_3 \ , \qquad D\left(C_2\right) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{5.35}$$

写变换并矢形式的方法是, 并矢中 $\vec{b}_i$ 的系数, 就是在此变换中 $\vec{a}_i$ 变成的矢量. 由并矢写变换矩阵形式时, 矩阵第 i 行第 j 列的元素就是并矢中 $\vec{a}_i\vec{b}_j$ 的系数.

设有晶格矢量 $\vec{f}$

$$\vec{f} = \vec{a}_1 f_1 + \vec{a}_2 f_2 + \vec{a}_3 f_3 \ , \qquad 0 \leqslant f_j < 1 \tag{5.36}$$

讨论 f_j 的可能取值. 利用式 (5.35) 计算下式

$$\vec{f} + \vec{\vec{2}} \cdot \vec{f} = \vec{a}_3\left(2f_3\right) \ , \qquad \vec{f} - \vec{\vec{2}} \cdot \vec{f} = \vec{a}_1\left(2f_1\right) + \vec{a}_2\left(2f_2\right)$$

由于式 (5.28), 此两式都仍是晶格矢量, 因而三个 f_j 都只能分别取 0 或 1/2. 根据我们选择晶格基矢的原则, 当 $f_3 = 0$ 时, 必须 $f_1 = f_2 = 0$, 反之, 当 $f_1 = f_2 = 0$ 时, $f_3 = 0$. 这样, $\vec{f}$ 有下面几种类型的解

$$\begin{aligned} &P\text{型格子}: \quad && \vec{f} = 0, \\ &A\text{型格子}: && \vec{f} = \left(\vec{a}_2 + \vec{a}_3\right)/2, \\ &B\text{型格子}: && \vec{f} = \left(\vec{a}_1 + \vec{a}_3\right)/2, \\ &I\text{型格子}: && \vec{f} = \left(\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3\right)/2 \end{aligned} \tag{5.37}$$

因为不能有 C 型格子, 所以 A 型和 B 型格子不能同时存在, 因而也就不能有 F 型格子. 由于 $\vec{a}_1$ 和 $\vec{a}_2$ 的地位是平等的, 对 B 型格子, 可以把 $\vec{a}_2$ 叫做 $\vec{a}_1$, 而把 $-\vec{a}_1$ 叫做 $\vec{a}_2$, 则 B 型格子变成了 A 型格子. 同样, 对 I 型格子, 可以把 $\vec{a}_1+\vec{a}_2$ 叫做 $\vec{a}_1$, 而 $\vec{a}_2$ 不变, 则 I 型格子变成了 A 型格子.

这样, 单斜晶系有两种布拉菲格子 P 型和 A 型, 六种简单空间群: $P2$, $P\overline{2}$, $P\pm2$, $A2$, $A\overline{2}$ 和 $A\pm2$.

四、正交晶系

正交晶系对应点群 D_2 $(22')$, C_{2v} $(2\overline{2}')$ 和 D_{2h} $(\pm22')$. 这些点群都包含三个互相垂直的二次轴, 取沿一个二次固有转动轴方向的最短晶格矢量为 $\vec{a}_3$, 沿另两个垂直的二次转动轴方向的最短晶格矢量分别为 $\vec{a}_1$ 和 $\vec{a}_2$, 并要求 $\vec{a}_1\times\vec{a}_2$ 沿 $\vec{a}_3$ 正向. 三个晶格基矢长度没有限制, 但方向互相垂直

$$\alpha_1=\alpha_2=\alpha_3=\pi/2 \tag{5.38}$$

在这组晶格基矢中, 沿 $\vec{a}_3$ 方向的二次轴转动元素的并矢形式和矩阵形式仍如式 (5.35) 所示, 沿 $\vec{a}_1$ 方向的二次轴转动元素的并矢形式和矩阵形式为

$$\vec{\vec{2'}}=\vec{a}_1\vec{b}_1-\vec{a}_2\vec{b}_2-\vec{a}_3\vec{b}_3\ ,\qquad D(C_2')=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix} \tag{5.39}$$

与单斜晶系的讨论类似, 若式 (5.36) 形式的 $\vec{f}$ 是晶格矢量, 则 $\vec{f}\pm\vec{\vec{R}}\cdot\vec{f}$ 也都是晶格矢量, 其中 $\vec{\vec{R}}$ 可取 $\vec{\vec{2}}$, $\vec{\vec{2'}}$ 和 $\vec{\vec{2}}\cdot\vec{\vec{2'}}$. 由此解得三个 f_j 都分别可取 0 或 1/2. 现在除式 (5.37) 给出的类型外, 还有

$$\begin{aligned}&C\text{型格子}: && \vec{f}=(\vec{a}_1+\vec{a}_2)/2,\\ &F\text{型格子}: && \vec{f}=(\vec{a}_1+\vec{a}_2)/2\ ,\ \ (\vec{a}_1+\vec{a}_3)/2\ \ \text{和}\ \ (\vec{a}_2+\vec{a}_3)/2\end{aligned} \tag{5.40}$$

对点群 D_2 和 D_{2h} 情况, A, B 和 C 型格子没有区别, 对点群 C_{2v} 情况, $\vec{a}_3$ 沿固有二次轴方向, 而 $\vec{a}_1$ 和 $\vec{a}_2$ 沿非固有二次轴方向, A 型格子和 B 型格子虽然仍然相同, C 型格子则与它们不一样, 但仍算同一种布拉菲格子.

这样, 正交晶系有四种布拉菲格子, P, C(或 A), I 和 F 型, 13 种简单空间群: $P22'$, $P2\overline{2}'$, $P\pm22'$, $C22'$, $C2\overline{2}'$, $A2\overline{2}'$, $C\pm22'$, $I22'$, $I2\overline{2}'$, $I\pm22'$, $F22'$, $F2\overline{2}'$, $F\pm22'$.

五、三方晶系和六方晶系

三方晶系对应点群 C_3 (3), C_{3i} $(\overline{3})$, D_3 $(32')$, C_{3v} $(3\overline{2}')$ 和 D_{3d} $(\overline{3}2')$. 取沿三次转动轴方向的最短晶格矢量为 $\vec{a}_3$. 在垂直 $\vec{a}_3$ 的平面内, 对点群 C_3 和 C_{3i} 的情况,

取一长度最短的晶格矢量为 $\vec{a}_1$, 对点群 D_3, C_{3v} 和 D_{3d} 的情况, 取沿等价的固有或非固有二次轴方向的最短晶格矢量为 $\vec{a}_1$. 取 $\vec{a}_2 = \vec{\vec{3}} \cdot \vec{a}_1$. 因此

$$a_1 = a_2\ , \qquad \alpha_1 = \alpha_2 = \pi/2\ , \qquad \alpha_3 = 2\pi/3 \tag{5.41}$$

在这组晶格基矢中, 点群生成元的并矢形式和矩阵形式分别为

$$\begin{aligned}
&\vec{\vec{3}} = \vec{a}_2\vec{b}_1 - (\vec{a}_1 + \vec{a}_2)\,\vec{b}_2 + \vec{a}_3\vec{b}_3\ , \qquad &&\vec{\vec{2}}' = \vec{a}_1\vec{b}_1 - (\vec{a}_1 + \vec{a}_2)\,\vec{b}_2 - \vec{a}_3\vec{b}_3, \\
&D\,(C_3) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad &&D\,(C_2') = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{5.42}$$

设式 (5.36) 形式的 $\vec{f}$ 是晶格矢量, 则

$$\vec{f} + \vec{\vec{3}} \cdot \vec{f} + \vec{\vec{3}} \cdot \vec{\vec{3}} \cdot \vec{f} = 3 f_3 \vec{a}_3$$

也是晶格矢量, 解得

$$f_3 = 0,\ 1/3\ \text{ 或 }\ 2/3 \tag{5.43}$$

对点群 D_3, C_{3v} 和 D_{3d} 的情况, 下面两式也是晶格矢量

$$\begin{aligned}
&\vec{f} + \vec{\vec{2}}' \cdot \vec{f} = (f_1 + f_1 - f_2)\,\vec{a}_1 + (f_2 - f_2)\,\vec{a}_2 = (2f_1 - f_2)\,\vec{a}_1, \\
&\vec{f} + \left(\vec{\vec{3}} \cdot \vec{\vec{2}}' \cdot \vec{\vec{3}} \cdot \vec{\vec{3}}\right) \cdot \vec{f} = (f_1 - f_1)\,\vec{a}_1 + (f_2 - f_1 + f_2)\,\vec{a}_2 = (2f_2 - f_1)\,\vec{a}_2
\end{aligned}$$

因此 $2f_1 - f_2$ 和 $2f_2 - f_1$ 只能分别等于 0 或 1. 它们不能同时为 1, 因为 f_1 和 f_2 都小于 1. 由此得三个解

$$f_1 = f_2 = 0\ , \qquad f_1 = 2f_2 = 2/3\ , \qquad 2f_1 = f_2 = 2/3 \tag{5.44}$$

注意, 当 $f_1 = f_2 = 0$ 时, f_3 也只能为零.

对点群 C_3 和 C_{3i} 的情况, 虽然没有二次轴, 但选取基矢 $\vec{a}_1$ 的原则仍可用来限制 $\vec{f}$, 使它取式 (5.43) 和 (5.44) 的解. 事实上, 由于下面矢量是晶格矢量

$$\vec{f} - \vec{\vec{3}} \cdot \vec{f} = (f_1 + f_2)\,\vec{a}_1 + (2f_2 - f_1)\,\vec{a}_2 \tag{5.45}$$

若 $(f_1 + f_2)$ 和 $(2f_2 - f_1)$, 减去整数部分后不都为零, 则得到的晶格矢量长度小于 a_1, 与选取 $\vec{a}_1$ 矢量的原则矛盾. 若 $f_1 + f_2 = 0$, 则得式 (5.44) 的第一个解. 若 $f_1 + f_2 = 1$ 和 $2f_2 - f_1$ 等于 0 或 1, 则得式 (5.44) 的后两个解. 有一点不同的是, 现在当 $f_3 = 0$ 时, 由于选取基矢 $\vec{a}_1$ 的原则, f_1 和 f_2 也只能为零.

这样, 根据式 (5.43) 和 (5.44), 三方晶系 $\vec{f}$ 的可能形式列举如下, 其中 $\vec{f}'$ 由 $2\vec{f}$ 除去晶格基矢的整数组合部分后得到

$$\begin{aligned}
&(1)\ \vec{f}=0\ ,\quad P\text{型格子}\ .\\
&(2)\ \vec{f}=(2\vec{a}_1+\vec{a}_2)/3\ \ \text{和}\ \ \vec{f}'=(\vec{a}_1+2\vec{a}_2)/3\ .\\
&(3)\ \vec{f}=(2\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3)/3\ \ \text{和}\ \ \vec{f}'=(\vec{a}_1+2\vec{a}_2+2\vec{a}_3)/3\ .\\
&(4)\ \vec{f}=(\vec{a}_1+2\vec{a}_2+\vec{a}_3)/3\ \ \text{和}\ \ \vec{f}'=(2\vec{a}_1+\vec{a}_2+2\vec{a}_3)/3\ .
\end{aligned} \tag{5.46}$$

其中, (2) 给出的 $\vec{f}$, 长度比 a_1 小, 对点群 C_3 和 C_{3i} 的情况, 它不是晶格矢量, 对其余情况, 可改取晶格基矢 $\vec{a}_1'$ 和 $\vec{a}_2'$ (如图 5.1 所示)

$$\begin{aligned}
\vec{a}_1' &= (2\vec{a}_1+\vec{a}_2)/3,\\
\vec{a}_2' &= (-\vec{a}_1+\vec{a}_2)/3=\overleftrightarrow{3}\cdot\vec{a}_1',\\
\vec{a}_1 &= \vec{a}_1'-\vec{a}_2',\\
\vec{a}_2 &= \vec{a}_1'+2\vec{a}_2'
\end{aligned} \tag{5.47}$$

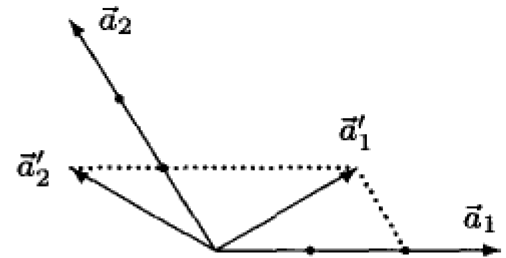


图 5.1 晶格基矢间的关系

则新的晶格基矢是原始的, 只是 $\vec{a}_1'$ 不沿二次轴方向, 而与二次轴夹 $\pi/6$ 的角. 略去新晶格基矢上的撇, 现在二次轴转动变换的并矢和矩阵形式为

$$\overleftrightarrow{2''}=-\vec{a}_2\vec{b}_1-\vec{a}_1\vec{b}_2-\vec{a}_3\vec{b}_3\ ,\qquad D(C_2'')=\begin{pmatrix}0&-1&0\\-1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix} \tag{5.48}$$

(1) 和 (2) 都给出 P 型格子, 但对点群 D_3, C_{3v} 和 D_{3d} 的情况, $\vec{a}_1$ 是不是沿二次轴方向, 对应两种不同的空间群. 因为这种格子和六方晶系的 P 型格子相同, 合并称为六方晶系 P 型布拉菲格子. 这样的六方晶系的 P 型布拉菲格子有 8 种简单空间群: $P3$, $P\bar{3}$, $P32'$, $P32''$, $P3\bar{2}'$, $P3\bar{2}''$, $P\bar{3}2'$ 和 $P\bar{3}2''$.

适当选择晶格基矢, 可以证明 (3) 和 (4) 是等价的. 因为 $\vec{a}_1+\vec{a}_2$ 是和 $\vec{a}_1$ 长度相同的晶格矢量, 而且对点群 D_3, C_{3v} 和 D_{3d} 的情况, 它也沿着一个二次轴方向. 把 $\vec{a}_1+\vec{a}_2$ 选作新的晶格基矢 $\vec{a}_1'$, 仍取 $\vec{a}_2'=\overleftrightarrow{3}\cdot\vec{a}_1'=-\vec{a}_1$, 则 (4) 变成了 (3).

对 (3), 取新的晶格基矢

$$\begin{aligned}
\vec{a}_1' &= (2\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3)/3=\overleftrightarrow{3}\cdot\vec{a}_3'\ , &\quad \vec{a}_3 &= \vec{a}_1'+\vec{a}_2'+\vec{a}_3',\\
\vec{a}_2' &= (-\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3)/3=\overleftrightarrow{3}\cdot\vec{a}_1'\ , &\quad \vec{a}_1 &= \vec{a}_1'-\vec{a}_2',\\
\vec{a}_3' &= (-\vec{a}_1-2\vec{a}_2+\vec{a}_3)/3=\overleftrightarrow{3}\cdot\vec{a}_2'\ , &\quad \vec{a}_2 &= \vec{a}_2'-\vec{a}_3'
\end{aligned} \tag{5.49}$$

则新的晶格基矢是原始的. 略去基矢上的撇, 在这组晶格基矢中点群生成元取如下

形式

$$\vec{\vec{3}} = \vec{a}_2\vec{b}_1 + \vec{a}_3\vec{b}_2 + \vec{a}_1\vec{b}_3\ , \qquad \vec{\vec{2'}} = -\vec{a}_2\vec{b}_1 - \vec{a}_1\vec{b}_2 - \vec{a}_3\vec{b}_3,$$

$$D(C_3) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad D(C_2') = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{5.50}$$

这种晶格称为菱方晶系 (rhombohedral)R 型布拉菲格子, 三个晶格基矢长度相等, 夹角相等

$$a_1 = a_2 = a_3, \qquad \alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3$$

这样的菱方晶系 R 型布拉菲格子有 5 种简单空间群: $R3$, $R\overline{3}$, $R32'$, $R3\overline{2}'$ 和 $R\overline{3}2'$.

六方晶系对应点群 C_6 (6), C_{3h} ($\overline{6}$), C_{6h} (± 6), D_6 ($62'$), C_{6v} ($6\overline{2}'$), D_{3h} ($\overline{6}2'$) 和 D_{6h} ($\pm 62'$). 取沿六次转动轴方向的最短晶格矢量为 $\vec{a}_3$. 在垂直 $\vec{a}_3$ 平面内, 对点群 C_6, C_{3h} 和 C_{6h} 的情况, 取一长度最短的晶格矢量为 $\vec{a}_1$, 对点群 D_6, C_{6v}, D_{3h} 和 D_{6h} 的情况, 在沿各二次轴方向的晶格矢量中取一长度最短的晶格矢量为 $\vec{a}_1$. 取 $\vec{a}_2 = \vec{\vec{3}} \cdot \vec{a}_1$. 因此晶格基矢满足式 (5.41). 注意, 对点群 D_{3h} 的情况, 在垂直 $\vec{a}_3$ 平面内有两组二次轴, 一组是固有二次轴, 另一组是非固有二次轴. $\vec{a}_1$ 是沿固有二次轴还是非固有二次轴方向, 对应两种不同的空间群.

在这组晶格基矢中, $\vec{\vec{2'}}$ 的形式如式 (5.42) 所示, 而

$$\vec{\vec{6}} = (\vec{a}_1 + \vec{a}_2)\,\vec{b}_1 - \vec{a}_1\vec{b}_2 + \vec{a}_3\vec{b}_3\ , \qquad D(C_6) = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{5.51}$$

设式 (5.36) 形式的 $\vec{f}$ 是晶格矢量, 则下式都是晶格矢量

$$\begin{aligned} &\vec{f} + \vec{\vec{2}} \cdot \vec{f} = 2f_3\vec{a}_3, \\ &\vec{f} + \vec{\vec{3}} \cdot \vec{f} + \vec{\vec{3}} \cdot \vec{\vec{3}} \cdot \vec{f} = 3f_3\vec{a}_3, \\ &\vec{f} - \vec{\vec{6}} \cdot \vec{f} = f_2\vec{a}_1 + (f_2 - f_1)\,\vec{a}_2 \end{aligned}$$

因此 $f_3 = 0$. 对点群 C_6, C_{3h} 和 C_{6h} 的情况, 要求第三式右面矢量长度不小于 a_1, 得 $f_1 = f_2 = 0$. 对点群 D_6, C_{6v}, D_{3h} 和 D_{6h} 的情况, 与三方晶系一样可解得式 (5.44). 但现在两矢量 $\vec{f} = (2\vec{a}_1 + \vec{a}_2)/3$ 和 $\vec{f}' = (\vec{a}_1 + 2\vec{a}_2)/3$ 都沿一个二次轴方向, 且长度比 a_1 短, 与选取 $\vec{a}_1$ 的原则矛盾, 故也有 $f_1 = f_2 = 0$.

总之, 这里又得到六方晶系 P 型布拉菲格子的另外 8 种简单空间群: $P6$, $P\overline{6}$, $P\pm 6$, $P62'$, $P6\overline{2}'$, $P\overline{6}2'$, $P\overline{6}2''$ 和 $P\pm 62'$.

六、四方晶系

四方晶系对应点群 C_4 (4), S_4 ($\overline{4}$), C_{4h} (± 4), D_4 ($42'$), C_{4v} ($4\overline{2}'$), D_{2d} ($\overline{4}2'$) 和 D_{4h} ($\pm 42'$). 取沿四次转动轴方向的最短晶格矢量为 $\vec{a}_3$. 在垂直 $\vec{a}_3$ 平面内, 对点群 C_4, S_4 和 C_{4h} 的情况, 取一长度最短的晶格矢量为 $\vec{a}_1$, 对点群 D_4, C_{4v}, D_{2d} 和 D_{4h} 的情况, 在沿各二次轴方向的晶格矢量中取一长度最短的晶格矢量为 $\vec{a}_1$. 取 $\vec{a}_2 = \vec{\vec{4}} \cdot \vec{a}_1$. 因此

$$a_1 = a_2\ , \qquad \alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \pi/2 \tag{5.52}$$

注意, 对点群 D_{2d} 的情况, 在垂直 $\vec{a}_4$ 平面内有两组二次轴, 一组是固有二次轴, 另一组是非固有二次轴. $\vec{a}_1$ 是沿固有二次轴还是非固有二次轴方向, 对应两种不同的空间群.

在这组晶格基矢中, 点群生成元的并矢形式和矩阵形式分别为

$$\begin{aligned}
&\vec{\vec{4}} = \vec{a}_2\vec{b}_1 - \vec{a}_1\vec{b}_2 + \vec{a}_3\vec{b}_3\ , && D(C_4) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\
&\vec{\vec{2}}' = \vec{a}_1\vec{b}_1 - \vec{a}_2\vec{b}_2 - \vec{a}_3\vec{b}_3\ , && \vec{\vec{2}}'' = \vec{a}_2\vec{b}_1 + \vec{a}_1\vec{b}_2 - \vec{a}_3\vec{b}_3, \\
&D(C_2') = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, && D(C_2'') = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{5.53}$$

设式 (5.36) 形式的 $\vec{f}$ 是晶格矢量, 则 $\vec{f} + \vec{\vec{2}} \cdot \vec{f} = 2f_3\vec{a}_3$ 也是晶格矢量, 解得

$$f_3 = 0 \ \text{或} \ 1/2 \tag{5.54}$$

对点群 D_4, C_{4v}, D_{2d} 和 D_{4h} 的情况, 下面各式也是晶格矢量

$$\begin{aligned}
&\vec{f} + \vec{\vec{2}}' \cdot \vec{f} = 2f_1\vec{a}_1, \\
&\vec{f} + \left\{\vec{\vec{4}} \cdot \vec{\vec{2}}' \cdot \left(\vec{\vec{4}}\right)^3\right\} \cdot \vec{f} = 2f_2\vec{a}_2, \\
&\vec{f} + \vec{\vec{2}}'' \cdot \vec{f} = (f_1 + f_2)(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)
\end{aligned}$$

因此 $f_1 = 0$ 或 $1/2$, $f_2 = 0$ 或 $1/2$, 但 $f_1 + f_2 \neq 1/2$, 即

$$f_1 = f_2 = 0 \ \text{或} \ 1/2 \tag{5.55}$$

注意, 当 $f_1 = f_2 = 0$ 时, f_3 也只能为零. 反之, 当 $f_3 = 0$ 时, $(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)/2$ 的长度比 a_1 短, 且沿一个二次轴方向, 与选取 $\vec{a}_1$ 的原则矛盾, 故只能 $f_1 = f_2 = 0$. 这就是说, 只有 P 型和 I 型布拉菲格子.

对点群 C_4, S_4 和 C_{4h} 的情况, 虽然没有二次轴, 但根据选取基矢 $\vec{a}_1$ 的原则, 仍可证明式 (5.55) 成立, 只是证明稍复杂. 由于下面矢量是晶格矢量

$$\begin{aligned}\vec{f}-\vec{\vec{4}}\cdot\vec{f}&=\vec{a}_1\left(f_1+f_2\right)+\vec{a}_2\left(f_2-f_1\right)\equiv\vec{f}',\\ \vec{f}'-\vec{\vec{4}}\cdot\vec{f}'&=\vec{a}_1\left(2f_2\right)+\vec{a}_2\left(-2f_1\right)\end{aligned}\tag{5.56}$$

首先, 若 $f_1=f_2$, 则由前式得式 (5.55), 同样有 P 型和 I 型布拉菲格子. 下面证明当 $f_1\neq f_2$ 时, 在与 $\vec{a}_3$ 垂直的平面内, 总能找到比 $\vec{a}_1$ 短的晶格矢量, 这与选取 $\vec{a}_1$ 的原则矛盾. 若 f_1 或 f_2 中有一个为零, 则由 (5.56) 后式知, 另一个必须为 1/2, 从而使 $\vec{f}'$ 的长度比 a_1 小. 若 $f_1+f_2\geqslant 1$, 则

$$a_1^2\left\{\left(f_1+f_2-1\right)^2+\left(f_2-f_1\right)^2\right\}=a_1^2\left\{1-2\left(f_1+f_2-f_1^2-f_2^2\right)\right\}<a_1^2$$

使 $\vec{f}'-\vec{a}_1$ 的长度比 a_1 小. 把此法用在 $\vec{f}'$ 上, 同理知 $2f_1<1$ 和 $2f_2<1$. 于是, 即使 $f_1+f_2<1$, 也有

$$|\vec{f}'|^2=a_1^2\left\{\left(f_1+f_2\right)^2+\left(f_2-f_1\right)^2\right\}=a_1^2\left\{2f_1^2+2f_2^2\right\}<a_1^2$$

这样, 四方晶系有两种布拉菲格子 P 型和 I 型, 16 种简单空间群: $P4$, $P\overline{4}$, $P\pm 4$ $P42'$, $P4\overline{2}'$, $P\overline{4}2'$, $P\overline{4}2''$, $P\pm 42'$, $I4$, $I\overline{4}$, $I\pm 4$, $I42'$, $I4\overline{2}'$, $I\overline{4}2'$, $I\overline{4}2''$, $I\pm 42'$.

七、立方晶系

立方晶系对应点群 T $(3'22')$, T_h $(\overline{3}'22')$, O $(3'42'')$, T_d $(3'\overline{4}\ \overline{2}'')$ 和 O_h $(\overline{3}42'')$. 沿三个互相垂直的二次转动轴 (对点群 T 和 T_h) 或四次转动轴 (对点群 O, T_d 和 O_h) 方向, 取最短的晶格矢量, 按右手螺旋方向, 选作三个晶格基矢, 它们长度相等, 且互相垂直

$$a_1=a_2=a_3\ ,\qquad \alpha_1=\alpha_2=\alpha_3=\pi/2\tag{5.57}$$

在这组晶格基矢中, 沿 $\vec{a}_3$ 方向的四次转动轴生成元的形式由式 (5.53) 给出, 二次转动轴的生成元为它的平方, 由式 (5.35) 给出, 沿 $(\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3)$ 方向的三次转动轴生成元由式 (5.50) 给出, 沿 $\vec{a}_1$ 方向和 $(\vec{a}_1+\vec{a}_2)$ 方向的二次转动轴生成元由式 (5.53) 给出.

设式 (5.36) 形式的 $\vec{f}$ 是晶格矢量, 则因立方晶系沿三个晶格基矢方向都有互相等价的二次轴, 故 f_1, f_2 和 f_3 分别都只能取 0 或 1/2, 且由于三个方向的等价性, A, B 和 C 型格子必定合成 F 型格子. 因此, 立方晶系有三种布拉菲格子 P, I 和 F, 15 种简单空间群: $P3'22'$, $P\overline{3}'22'$, $P3'42''$, $P3'\overline{4}\ \overline{2}''$, $P\overline{3}'42''$, $I3'22'$, $I\overline{3}'22'$, $I3'42''$, $I3'\overline{4}\ \overline{2}''$, $I\overline{3}'42''$, $F3'22'$, $F\overline{3}'22'$, $F3'42''$, $F3'\overline{4}\ \overline{2}''$ 和 $F\overline{3}'42''$.

在附录 17 中列出 7 种晶系, 14 种布拉菲格子和 73 种简单空间群, 并列出晶格基矢及其与转动轴向的关系. 表后面还列出子循环点群生成元在这些晶格基矢中的矩阵形式.

5.4 空 间 群

本节讨论除简单空间群外的一般空间群，就是晶格点群中至少有一个元素 R 不是晶体的对称变换，而 $g(R,\vec{t})$ 才是晶体的对称变换. 我们先要一般地研究变换 R 对 $\vec{t}$ 的限制，坐标系原点的选择对 $\vec{t}$ 的影响，然后介绍空间群的符号和由给定晶格点群诱导出不等价空间群的方法，最后举例说明如何根据晶体空间群的符号，找出该晶体的具体对称性质.

一、对称元

晶体的对称变换一般地表为

$$\begin{aligned} &g(R,\vec{\alpha}) = T(\vec{\ell})g(R,\vec{t}) , \qquad \vec{\alpha} = \vec{\ell} + \vec{t}, \\ &\vec{t} = \sum_{j=1}^{3} \vec{a}_j t_j , \qquad 0 \leqslant t_j < 1 \end{aligned} \tag{5.58}$$

对给定的晶体，晶格点群 G 已确定，在选定的坐标系中，群 G 的每一个元素 R 都对应唯一确定的 $\vec{t}$. 我们先来研究变换 R 对矢量 $\vec{t}$ 的限制，然后再研究坐标原点的重新选择对 $\vec{t}$ 的影响，由此介绍晶体对称元的概念.

由 R 自乘构成的固有或非固有循环点群共有 10 种. 为方便起见，在这一节，我们把固有循环点群生成元记作 C_N，非固有循环点群生成元记作 S_N，N 取 1, 2, 3, 4 和 6. 群元素相加后取并矢，记作 $\left\{\vec{\vec{R}}\right\}$. 因为对任何矢量 $\vec{r}$，有

$$\vec{\vec{R}} \cdot \left\{\vec{\vec{R}}\right\} \cdot \vec{r} = \left\{\vec{\vec{R}}\right\} \cdot \vec{r} \tag{5.59}$$

所以矢量 $\left\{\vec{\vec{R}}\right\} \cdot \vec{r}$ 在转动 R 中保持不变. 我们知道，$C_N(N \neq 1)$ 只保持转轴 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 上的矢量不变，S_2 是平面反射，它保持反射平面上的矢量不变，没有非零矢量能在其他非固有转动 $S_N(N \neq 2)$ 中保持不变. 因此，$\left\{\vec{\vec{C}}_N\right\}$ 正比于 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向的投影算符 $\hat{\boldsymbol{n}}\hat{\boldsymbol{n}}$，$\left\{\vec{\vec{S}}_2\right\}$ 正比于垂直 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向的投影算符 $\left(\vec{\vec{1}} - \hat{\boldsymbol{n}}\hat{\boldsymbol{n}}\right)$，有

$$\begin{aligned} &\left\{\vec{\vec{C}}_1\right\} = \vec{\vec{1}} , \qquad &&\left\{\vec{\vec{C}}_N\right\} = N\hat{\boldsymbol{n}}\hat{\boldsymbol{n}} , \qquad &&N \neq 1, \\ &\left\{\vec{\vec{S}}_2\right\} = 2\left(\vec{\vec{1}} - \hat{\boldsymbol{n}}\hat{\boldsymbol{n}}\right) , \qquad &&\left\{\vec{\vec{S}}_N\right\} = 0 , \qquad &&N \neq 2 \end{aligned} \tag{5.60}$$

显然，除了 $(S_1)^2 = (S_3)^6 = E$ 外，其他点群生成元都满足 $(C_N)^N = (S_N)^N = E$.

一般地表为 $(R)^{N'}=E$, 则

$$\left[g(R,\vec{t})\right]^{N'}=T\left(\left\{\vec{\bar{R}}\right\}\cdot\vec{t}\right)=T(\vec{\ell}) \tag{5.61}$$

这条件给出了对矢量 $\vec{t}$ 很强的限制

$$\begin{aligned}
&\vec{t}=0, && \text{当}\ \ R=C_1=E\\
&N\left[\hat{\boldsymbol{n}}\left(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\vec{t}\right)\right]=N\vec{t}_{\parallel}=m\vec{a}_{\parallel}\ , && \text{当}\ \ R=C_N\ ,\ \ N\neq 1\\
&2\left[\vec{t}-\hat{\boldsymbol{n}}\left(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\vec{t}\right)\right]=2\vec{t}_{\perp}=m\vec{a}_{\perp}\ , && \text{当}\ \ R=S_2\\
&\vec{t}\ \ \text{无限制}\ , && \text{当}\ \ R=S_N\ ,\ \ N\neq 2
\end{aligned} \tag{5.62}$$

其中, $\vec{t}_{\parallel}=\hat{\boldsymbol{n}}\left(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\vec{t}\right)$ 和 $\vec{t}_{\perp}=\vec{t}-\vec{t}_{\parallel}$ 分别表矢量 $\vec{t}$ 在平行和垂直 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向的分量. 当 $R=C_1$ 时, $\vec{t}$ 只能为零. 当 $R=C_N$ $(N\neq 1)$ 时, $\vec{t}_{\parallel}$ 只能等于 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向最短晶格矢量 $\vec{a}_{\parallel}$ 的 m/N 倍, 其中 m 是整数. 当 $R=S_2$ 时, $\vec{t}_{\perp}$ 只能沿垂直 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 的某晶格矢量方向, 长度等于该方向最短晶格矢量 $\vec{a}_{\perp}$ 的半整数倍. 下面我们将证明, 这些 $\vec{t}$ 矢量受限制的部分才是对称变换 $g(R,\vec{t})$ 的特征部分, 它们在坐标原点的平移中保持不变. 凡是 $\vec{t}$ 矢量不受限制的部分, 都可以通过坐标原点的适当选择而消去.

设 O 点相对 O' 点的矢径是 $\vec{r}_0$, 以 O' 为原点时对称变换表为 $g(R,\vec{t})$, 若以 O 为原点, 则同一对称变换的表达形式会发生变化, 记为 g'. 设以 O 为原点的定坐标系是 K, 固定在系统上的动坐标系 K', 开始与 K 重合, 做平移变换 $T(-\vec{r}_0)$ 后, 原点移到 O' 点位置. 所研究的对称变换在 K' 系中始终用 $g(R,\vec{t})$ 表达, 但在 K 系中由 $g(R,\vec{t})$ 变为 g'. 根据算符的变换公式 (3.19), 得

$$g'=T(-\vec{r}_0)g(R,\vec{t})T(\vec{r}_0)=g\left[R,\vec{t}+(R-E)\vec{r}_0\right] \tag{5.63}$$

可见, 同一变换的算符形式随坐标原点的选择不同而发生变化. 若当坐标原点选在 O' 点时, 一变换的算符形式是 $g(R,\vec{t})$, 则当坐标原点改选在 O 点时, 该变换的算符形式变为 $g\left[R,\vec{t}+(R-E)\vec{r}_0\right]$, 其中 $\vec{r}_0$ 是 O 点相对 O' 点的矢径. 也可用坐标系平移的语言来描述算符的这一变化: 坐标原点平移 $\vec{r}_0$, 对变换算符形式 $g(R,\vec{t})$ 的影响, 是使矢量 $\vec{t}$ 改变 $(R-E)\vec{r}_0$. 坐标原点平移 $\vec{r}_0$, 就是系统平移 $-\vec{r}_0$, 这里涉及变换的两种观点, 很容易混淆, 希望读者认真想清楚.

现在我们对不同的 R, 分别讨论如何通过坐标原点的重新选择来简化矢量 $\vec{t}$. 当 $R=C_N$, $N\neq 1$ 时, 坐标原点平移 $\vec{r}_0$ 引起 $\vec{t}$ 的改变量 $(R-E)\vec{r}_0$ 垂直 R 的转动轴. 在此垂直平面内 C_N 的本征值不等于 1, 因而方程 $(C_N-E)\vec{r}_0=-\vec{t}_{\perp}$ 有解, 可选择 $\vec{r}_0$ 把 $\vec{t}_{\perp}$ 消去. 当 $R=S_2$ 时, 由坐标原点平移引起 $\vec{t}$ 的改变量平行 R 的转动轴, 即垂直 S_2 的反射平面. 在转动轴方向方程 $(S_2-E)\vec{r}_0=-2\hat{\boldsymbol{n}}(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\vec{r}_0)=-\vec{t}_{\parallel}$ 有

解, 可选 $\vec{r}_0=\vec{t}_{\parallel}/2$ 消去 $\vec{t}_{\parallel}$. 当 $R=S_N$, $N\neq 2$ 时, 由于 S_N 的矩阵本征值不等于 1, 方程 $(S_N-E)\vec{r}_0=-\vec{t}$ 有解, 可选择 $\vec{r}_0$ 把 $\vec{t}$ 消去. $R=E$ 的情况是平庸的, $\vec{t}$ 不随坐标原点平移发生变化. 这就是说, 在式 (5.62) 中, $\vec{t}$ 矢量受限制的部分在坐标原点的平移中保持不变, 而不受限制的部分可以通过适当选择坐标原点而消去. 注意, 如果晶格矢量 $\vec{L}$ 中包含有 $\vec{t}$ 矢量受限制的分量, 可以通过减除晶格矢量 $\vec{L}$ 再重新选择坐标原点的方法进一步简化 $\vec{t}$ 矢量. 在第五小节将通过例子来说明这点.

在对称变换 $g(R,\vec{t})$ 中保持不变的点称为该变换的对称中心. 有对称中心的对称变换称为封闭变换, 否则称为开变换. 对称中心的坐标 $\vec{r}_0$ 满足

$$\left[g(R,\vec{t})-E\right]\vec{r}_0=(R-E)\,\vec{r}_0+\vec{t}=0 \tag{5.64}$$

与式 (5.63) 比较可知, 若以对称中心为坐标原点, 则此对称变换的表达形式就是 R. 因为 $R^{N'}=E$, 而恒元的算符形式与坐标原点选择无关, 所以封闭变换满足

$$\left[g(R,\vec{t})\right]^{N'}=E \tag{5.65}$$

把式 (5.61) 代入知, 封闭变换 $g(R,\vec{t})$ 中的 $\vec{t}$ 矢量满足

$$\left\{\vec{R}\right\}\cdot\vec{t}=0 \tag{5.66}$$

可见对封闭变换, 式 (5.62) 中的 m 为零, 即 $\vec{t}$ 矢量受限制的部分必须为零, 而不受限制的部分, 恰好是满足条件 (5.66) 的. 反过来说, 式 (5.62) 中 m 不为零的两种情况是开变换. 因此, 式 (5.66) 是封闭变换的充要条件, 满足条件式 (5.66) 的变换 $g(R,\vec{t})$ 一定是封闭变换, 其中的 $\vec{t}$ 矢量可以通过重新选择坐标原点而消去.

封闭变换 $g(R,\vec{t})$ 都存在对称中心, 对称中心位置 $\vec{r}_0$ 由解方程 (5.64) 得到. 当 $R=C_N$, $N\neq 1$ 时, 通过对称中心平行 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向的直线称为对称直线, 在此直线上所有点都是对称中心. 当 $R=S_2$ 时, 通过对称中心垂直 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向的平面称为对称平面, 在此平面上所有点都是对称中心.

只有在式 (5.62) 中 m 不为零的两类情况是开变换. 适当选择坐标原点后, 开变换可表为

$$\begin{aligned} &g\left(C_N,\vec{t}_{\parallel}\right), \qquad N\neq 1, \qquad \vec{t}_{\parallel}=\vec{a}_{\parallel}m/N\neq 0\\ &g\left(S_2,\vec{t}_{\perp}\right), \qquad\qquad\qquad\quad \vec{t}_{\perp}=\vec{a}_{\perp}/2\neq 0 \end{aligned} \tag{5.67}$$

前者是绕 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向转动 $2\pi/N$ 角后, 再沿 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向滑移 $\vec{t}_{\parallel}$ 距离. 虽然有滑移, 但作为一条直线, 这个旋转轴在变换中保持不变, 是对称直线, 称为螺旋轴. 后者是先对垂直 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向的平面做反射, 再在此平面中滑移 $\vec{t}_{\perp}$ 距离. 这个平面在变换中保持不变, 是对称平面, 称为滑移平面. 当然螺旋轴和滑移平面上的点都不是对称中心.

设矢量 $\vec{t}$ 垂直和平行转动轴 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向的分量分别记作 $\vec{t}_{\perp}$ 和 $\vec{t}_{\parallel}$, 则螺旋轴和滑移平面的位置确定办法如下. 对开变换 $g(C_N,\vec{t})$ $(N\neq 1)$, 把 $\vec{t}_{\perp}$ 作为 $\vec{t}$ 矢量代入式

(5.64), 解得 $\vec{r}_0$, 通过 $\vec{r}_0$ 点沿 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向的轴就是螺旋轴, $\vec{t}_{\parallel}$ 就是沿轴向的滑移矢量. 对开变换 $g(S_2,\vec{t})$, 把 $\vec{t}_{\parallel}$ 作为 $\vec{t}$ 矢量代入式 (5.64), 解得 $\vec{r}_0$, 通过 $\vec{r}_0$ 点垂直 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向的平面就是滑移平面, $\vec{t}_{\perp}$ 就是在此平面上的滑移矢量. 当然, 螺旋轴上的滑移矢量 $\vec{t}_{\parallel}$ 和滑移平面上的滑移矢量 $\vec{t}_{\perp}$ 都必须满足式 (5.62) 给出的限制.

二、空间群的符号

对给定的晶体, 可以根据它的晶格点群和晶格矢量的分布, 确定它所属的晶系和布拉非格子, 并以该晶系和布拉非格子的标准方法选择晶格基矢和定出可能的 $\vec{f}$ 矢量形式. 该晶体的对称变换的一般形式为

$$g(R,\vec{\alpha}) = T(\vec{L})g(R,\vec{t}) \ , \qquad \vec{L} = \vec{\ell} \ \text{或} \ \vec{\ell} + \vec{f} \tag{5.68}$$

其中, $\vec{\ell}$ 表晶格基矢 $\vec{a}_i$ 的整数线性组合, 而 $\vec{f}$ 则表晶格基矢的分数线性组合, 分数值由布拉非格子决定.

当晶格点群为 C_1 时, 显然 $\vec{t}=0$, 此时只有简单空间群. 对其他 31 种点群, 根据表 5.3, 点群元素都可以表为一个, 两个或三个循环子群元素的乘积. 对一般空间群, 每个循环子群生成元都有相应的矢量 $\vec{t}$, 把它们补在子群元素上, 就得空间群元素的一般形式

$$T(\vec{L})\left\{g(R,\vec{t})\right\}^n \tag{5.69a}$$

$$T(\vec{L})\left\{g(R,\vec{t})\right\}^n \left\{g(R_1,\vec{p})\right\}^{n_1} \tag{5.69b}$$

$$T(\vec{L})\left\{g(R,\vec{t})\right\}^n \left\{g(R_2,\vec{q})\right\}^{n_2} \left\{g(R_1,\vec{p})\right\}^{n_1} \tag{5.69c}$$

其中, n, n_1 和 n_2 是整数, $\vec{t}$, $\vec{p}$ 和 $\vec{q}$ 是晶格基矢 $\vec{a}_i$ 的非负分数线性组合, 组合系数小于 1

$$0 \leqslant t_j < 1 \ , \qquad 0 \leqslant p_j < 1 \ , \qquad 0 \leqslant q_j < 1 \tag{5.70}$$

采用空间群国际符号, 在相应的简单空间群符号中, 代表三个循环子群的数字右下角, 分别注上矢量 $\vec{t}$, $\vec{q}$ 和 $\vec{p}$ 的分量, 就得到一般空间群的符号. 当这些作为下标的矢量为零时予以省略. 这些矢量 $\vec{t}$, $\vec{p}$ 和 $\vec{q}$ 要满足一定的条件. 上一小节, 详细讨论了点群元素 R 产生的循环群对矢量 $\vec{t}$ 的限制条件 (5.62). 这只是一个条件. 第二个条件是空间群的性质对这些矢量的限制, 就是说, 式 (5.69) 给出的群元素, 在相乘以后, 移去平移变换 $T(\vec{L})$, 这些矢量 $\vec{t}$, $\vec{p}$ 和 $\vec{q}$ 仍必须相同. 第三个条件是坐标原点选择的影响. 上一小节研究了矢量 $\vec{t}$ 可通过坐标原点的重新选择得到简化. 但是作为一个空间群, 坐标原点只能作统一的选择, 不能对每个元素作不同的选择. 对同一个空间群, 由于坐标原点选择的不同, 会使这些矢量 $\vec{t}$, $\vec{p}$ 和 $\vec{q}$ 看起来不相同. 由于原点的不同选择产生的不同的空间群符号称为等价的符号. 需要找出所有可能的不等价的空间群符号. 为此, 应该用统一的方法选择坐标原点, 用群的条件限制这些

矢量的可能取值, 然后检验这些取值等价的可能性, 尽可能选取最简单的表达方式. 最后得到的不等价的空间群共有 230 种, 列于附录 18.

* 三、确定空间群的方法

首先, 我们选取坐标原点, 使式 (5.69) 中 $g(R,\vec{t})$ 的 $\vec{t}$ 矢量尽量简单. 根据 R 的不同, 把空间群分成三种类型.

(1) A 型: $R=S_N$, $N\neq 2$. 此时 $g(R,\vec{t})$ 有对称中心, 把坐标原点选在这对称中心上, 可使 $\vec{t}=0$. 在保持 $\vec{t}=0$ 的条件下, 按式 (5.63), 坐标原点还允许平移满足下式的 $\vec{r}_0$

$$(R-E)\,\vec{r}_0=\vec{L} \tag{5.71}$$

$\vec{L}$ 由式 (5.68) 给出. 这种选择可用来简化矢量 $\vec{p}$ 和 $\vec{q}$.

属 A 型的空间群, 它们的晶格点群有 15 个: C_i, C_{3i}, S_4, C_{3h}, C_{2h}, C_{4h}, C_{6h}, D_{2d}, D_{3d}, D_{3h}, D_{2h}, D_{4h}, D_{6h}, T_h 和 O_h.

(2) B 型: $R=C_N$, $N\neq 1$. 此时 $g(R,\vec{t})$ 有对称直线, 把坐标原点选在这对称直线上, 可使

$$\vec{t}=\vec{t}_{\|}=\vec{a}_{\|}m/N\ , \qquad 0\leqslant m<N$$

其中, $\vec{a}_{\|}$ 是沿 R 的转轴 $\hat{n}$ 方向最短晶格矢量. 按式 (5.63), 坐标原点还允许平移满足下式的 $\vec{r}_0$

$$(R-E)\,\vec{r}_0=\vec{L}+\vec{a}_{\|}m'/N\ , \qquad 0\leqslant m'<N \tag{5.72}$$

其中, 含 m' 的项可用来进一步简化 $\vec{t}$, 然后再让 $m'=0$, 做坐标原点的新选择式 (5.72), 来简化 $\vec{p}$ 和 $\vec{q}$. 读者可能会感到奇怪, 式 (5.72) 左面明明与 R 的转动轴垂直, 为什么能改变 $\vec{t}_{\|}$ 呢? 原因在于 $\vec{L}$ 可能有平行转动轴的分量, 从而对简化 $\vec{t}$ 矢量作出贡献. 上一节我们曾强调, 坐标原点的选择不能改变 $g(C_N,\vec{t})$ 中的 $\vec{t}_{\|}$ 分量, 但是若同时考虑平移变换的影响, $\vec{t}_{\|}$ 分量是有可能改变的. 通过本节第五小节的例子, 可以帮助读者理解这一问题.

属 B 型的空间群, 它们的晶格点群有 15 个: C_2, C_3, C_4, C_6, D_2, C_{2v}, D_3, C_{3v}, D_4, C_{4v}, D_6, C_{6v}, T, O 和 T_d.

(3) C 型: $R=S_2$, 对应的点群只有 C_s. 此时 $g(R,\vec{t})$ 有对称平面, 把坐标原点选在这对称平面上, $\vec{t}$ 允许取 0, $\vec{a}_1/2$, $\vec{a}_2/2$ 和 $(\vec{a}_1+\vec{a}_2)/2$. 对 P 型格子, 可把晶格基矢 $\vec{a}_1$ 就选在这不为零的 $\vec{t}$ 方向, 则 $\vec{t}=\vec{a}_1/2$. 对 A 型格子, $\vec{a}_2/2$ 可作为晶格矢量 $\vec{f}=(\vec{a}_2+\vec{a}_3)/2$ 的一部分而移去, 余下的 $-\vec{a}_3/2$ 再通过坐标原点的平移来消去. 因此, 除简单空间群外, C 型空间群只有两种: $P\overline{2}_{\frac{1}{2}00}$ 和 $A\overline{2}_{\frac{1}{2}00}$.

对 A 型和 B 型空间群, 需要进一步研究矢量 $\vec{p}$ 和 $\vec{q}$ 所受到的限制. 它们一方面受到点群元素的限制 [见条件式 (5.62)], 另一方面还要受群元素乘积封闭性引起的限制.

观察情况 (5.69b) 对应的点群, 发现它们中或者 $R = C_i$, 或者 R_1 是二次固有或非固有转动, 且转动轴与 R 的转动轴垂直, 因而 $R_1R^{-1} = RR_1$, 要求 $\vec{p}$ 满足

$$g\left(R_1, \vec{p} + \vec{L}\right) = g\left(R, \vec{t}\right) g\left(R_1, \vec{p}\right) g\left(R, \vec{t}\right) \tag{5.73}$$

在满足式 (5.62) 和 (5.73) 的条件下, 按式 (5.71) 或 (5.72) 选择坐标原点, 再使 $\vec{p}$ 尽量简单, 从而定出可能的空间群.

对情况 (5.69c), 因为存在三个循环群元素的乘积, 限制条件变得更多. 计算表明, 对此情况, 点群元素乘积满足

$$\begin{aligned} & R_1R_2^{-1} = R_2R_1\ , \quad R_1R = R^iR_2^jR_1^k\ , \quad R_2R = R^{i'}R_2^{j'}R_1^{k'}, \\ & \text{对 } D_{2h},\ D_{4h} \text{ 和 } D_{6h} \text{ 群有 } i = k = i' = j' = 1\ , \quad j = k' = 0, \\ & \text{对 T, 和 } T_h \text{ 群有 } i = j = i' = j' = k' = 1\ , \quad k = 0, \\ & \text{对 O, } T_d, \text{ 和 } O_h \text{ 群有 } i = i' = j' = -1\ , \quad j = 1\ , \quad k = k' = 0 \end{aligned} \tag{5.74}$$

由此要求 $\vec{p}$ 和 $\vec{q}$ 满足

$$\begin{aligned} & g\left(R_1, \vec{p} + \vec{L}_1\right) = g\left(R_2, \vec{q}\right) g\left(R_1, \vec{p}\right) g\left(R_2, \vec{q}\right), \\ & g\left(R_1, \vec{p} + \vec{L}_2\right) = g\left(R, \vec{t}\right)^i g\left(R_2, \vec{q}\right)^j g\left(R_1, \vec{p}\right)^k g\left(R, \vec{t}\right)^{-1}, \\ & g\left(R_2, \vec{q} + \vec{L}_3\right) = g\left(R, \vec{t}\right)^{i'} g\left(R_2, \vec{q}\right)^{j'} g\left(R_1, \vec{p}\right)^{k'} g\left(R, \vec{t}\right)^{-1} \end{aligned} \tag{5.75}$$

同样在满足式 (5.62) 和 (5.75) 的条件下, 按式 (5.71) 或 (5.72) 进一步选择坐标原点, 使 $\vec{p}$ 和 $\vec{q}$ 尽量简单, 从而定出可能的空间群. 由于篇幅所限, 不能把 230 种空间群全部计算一遍. 下面只对 (5.69b) 的情况, 举两个例子, 说明计算方法.

* 四、*A* 型空间群举例

设晶体的晶格点群是 C_{4h} 群, 它可表为 C_iC_4 的乘积形式, 点群的国际符号是 ± 4. 晶体属四方晶系, 三个晶格基矢互相垂直, $\vec{a}_3$ 沿四次轴方向, $a_1 = a_2$, 四次轴生成元并矢形式为

$$\vec{\vec{4}} = \vec{a}_2\vec{b}_1 - \vec{a}_1\vec{b}_2 + \vec{a}_3\vec{b}_3$$

有两种布拉菲格子 P 和 I, P 型格子 $\vec{f} = 0$, I 型格子 $\vec{f} = (\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3)/2$.

把坐标原点取在 $g(S_1, \vec{t})$ 的对称中心, 则 $\vec{t} = 0$, 坐标原点还允许平移满足 $(S_1 - E)\vec{r}_0 = -2\vec{r}_0 = \vec{L}$ 的 $\vec{r}_0$

$$-\vec{r}_0 = \frac{\vec{L}}{2} = \begin{cases} \vec{\ell}/2, & P \text{ 型} \\ \vec{\ell}/2 \text{ 或 } \left(\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3\right)/4, & I \text{ 型} \end{cases}$$

由于

$$(C_4-E)\vec{\ell}/2=-(\ell_2+\ell_1)\vec{a}_1/2+(\ell_1-\ell_2)\vec{a}_2/2,$$
$$(C_4-E)(\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3)/4=-\vec{a}_1/2$$

选择原点可使 $\vec{p}$ 改变下式的整数倍

$$(C_4-E)\vec{r}_0=\begin{cases}(\vec{a}_1-\vec{a}_2)/2 \text{ 或 } (\vec{a}_1+\vec{a}_2)/2, & P\text{ 型}\\ (\vec{a}_1-\vec{a}_2)/2,\ (\vec{a}_1+\vec{a}_2)/2 \text{ 或 } \vec{a}_1/2, & I\text{ 型}\end{cases} \tag{5.76}$$

由式 (5.73), 得

$$S_1g(C_4,\vec{p})S_1=g(C_4,-\vec{p})=g(C_4,\vec{p}+\vec{L}'),$$

$$\vec{p}=-\frac{\vec{L}'}{2}=\begin{cases}\vec{\ell}/2, & P\text{ 型}\\ \vec{\ell}/2 \text{ 或 } (\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3)/4, & I\text{ 型}\end{cases}$$

即对 P 型格子, $\vec{p}$ 有如下可能取值

$$\begin{array}{llll}0, & \vec{a}_1/2, & (\vec{a}_1+\vec{a}_2)/2, & (\vec{a}_1+\vec{a}_3)/2\\ \vec{a}_2/2, & \vec{a}_3/2, & (\vec{a}_2+\vec{a}_3)/2, & (\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3)/2\end{array}$$

经式 (5.76) 简化, $\vec{a}_1/2$ 和 $\vec{a}_2/2$ 等价, $(\vec{a}_1+\vec{a}_2)/2$ 可以消去. 同理, $(\vec{a}_1+\vec{a}_3)/2$ 和 $(\vec{a}_2+\vec{a}_3)/2$ 等价, $(\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3)/2$ 和 $\vec{a}_3/2$ 等价. 因此, 只有 $0, \vec{a}_1/2, \vec{a}_3/2$ 和 $(\vec{a}_2+\vec{a}_3)/2$ 是独立的. 对 I 型格子, $(\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3)/2$ 是晶格矢量, 通过式 (5.76) 简化, 可进一步消去 $\vec{a}_1/2$ 和 $(\vec{a}_2+\vec{a}_3)/2$, 另一方面, $\vec{p}$ 又增加了一种可能取值: $(\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3)/4$. 最后得空间群如下

$$P\pm 4,\quad P\pm 4_{\frac{1}{2}00},\quad P\pm 4_{00\frac{1}{2}},\quad P\pm 4_{0\frac{1}{2}\frac{1}{2}},\quad I\pm 4,\quad I\pm 4_{\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}} \tag{5.77}$$

* 五、B 型空间群举例

设晶体的晶格点群是 D_3 群, 它可表为 C_3C_2' 或 C_3C_2'' 的乘积形式, 点群的国际符号是 $32'$ 或 $32''$. 晶体属六方晶系的 P 型布拉菲格子或菱方晶系的 R 型布拉菲格子, 两种格子的 $\vec{f}$ 都是零.

(1) 对六方晶系的 P 型布拉菲格子, $\vec{a}_3$ 沿三次轴方向, $\alpha_1=\alpha_2=\pi/2$, $\alpha_3=2\pi/3$, $a_1=a_2$, 生成元的并矢形式为

$$\begin{aligned}&\vec{\vec{3}}=\vec{a}_2\vec{b}_1-(\vec{a}_1+\vec{a}_2)\vec{b}_2+\vec{a}_3\vec{b}_3, && \text{对点群 } 32' \text{ 或 } 32''\\ &\vec{\vec{2'}}=\vec{a}_1\vec{b}_1-(\vec{a}_1+\vec{a}_2)\vec{b}_2-\vec{a}_3\vec{b}_3, && \text{对点群 } 32'\\ &\vec{\vec{2''}}=-\vec{a}_2\vec{b}_1-\vec{a}_1\vec{b}_2-\vec{a}_3\vec{b}_3, && \text{对点群 } 32''\end{aligned}$$

把坐标原点取在 $g(C_3,\vec{t})$ 的对称直线上, 则 $\vec{t}=0$, $\vec{a}_3/3$ 或 $2\vec{a}_3/3$. 由于 P 型格子, $\vec{t}$ 不能再做简化. 由式 (5.72), 坐标原点还允许做平移 $\vec{r}_0$ 来简化 $\vec{p}$

$$(C_3-E)\,\vec{r}_0=-\vec{a}_1(r_{01}+r_{02})+\vec{a}_2(r_{01}-2r_{02})=\vec{\ell},$$

$$r_{01}=(-2\ell_1+\ell_2)/3\ ,\qquad r_{02}=-(\ell_1+\ell_2)/3\ ,\qquad r_{03}\ \text{任意}$$

对点群 $32'$, $\vec{p}$ 允许做如下的改变

$$\begin{aligned}(C_2'-E)\vec{r}_0 &= -\vec{a}_1r_{02}-\vec{a}_22r_{02}-\vec{a}_32r_{03}\\ &= (\vec{a}_1+2\vec{a}_2)(\ell_1+\ell_2)/3-\vec{a}_32r_{03}\end{aligned}\tag{5.78}$$

对点群 $32''$, $\vec{p}$ 允许做如下的改变

$$\begin{aligned}(C_2''-E)\vec{r}_0 &= -(\vec{a}_1+\vec{a}_2)(r_{01}+r_{02})-\vec{a}_32r_{03}\\ &= (\vec{a}_1+\vec{a}_2)\ell_1-\vec{a}_32r_{03}\end{aligned}\tag{5.79}$$

其中, ℓ_1 和 ℓ_2 是整数, r_{03} 任意. 注意, $(\vec{a}_1+2\vec{a}_2)$ 与 C_2' 的转动轴垂直, 而 $(\vec{a}_1+\vec{a}_2)$ 与 C_2'' 的转动轴垂直.

对点群 $32'$, 由式 (5.62) 得 $p_1=0$ 或 $1/2$, 式 (5.73) 要求矢量 $\vec{p}$ 满足

$$\begin{aligned}g(C_2',\vec{p}+\vec{\ell}') &= g(C_3,\vec{t})g(C_2',\vec{p})g(C_3,\vec{t})\\ &= g(C_2',\vec{t}+C_3\vec{p}+C_3C_2'\vec{t})=g(C_2',C_3\vec{p})\end{aligned}$$

其中, 因为 $\vec{t}$ 沿 $\vec{a}_3$ 方向, $\vec{t}+C_3C_2'\vec{t}=0$. 由此得

$$\vec{\ell}'=(C_3-E)\vec{p}=-\vec{a}_1(p_1+p_2)+\vec{a}_2(p_1-2p_2)$$

解得 p_3 任意,

$$p_1=(-2\ell_1'+\ell_2')/3\ ,\qquad p_2=-(\ell_1'+\ell_2')/3\tag{5.80}$$

其中, ℓ_1' 和 ℓ_2' 是整数, 因而排除 $p_1=1/2$, 得 $p_1=p_2=0$. p_3 可被式 (5.78) 的变换消去.

对点群 $32''$, 沿 C_2'' 转动轴方向的最小晶格矢量是 $(\vec{a}_1-\vec{a}_2)$, 式 (5.61) 要求下式是晶格矢量

$$(E+C_2'')\vec{p}=(\vec{a}_1-\vec{a}_2)(p_1-p_2)$$

得 $p_1=p_2$. 由式 (5.73), 矢量 $\vec{p}$ 满足

$$\begin{aligned}g(C_2'',\vec{p}+\vec{\ell}') &= g(C_3,\vec{t})g(C_2'',\vec{p})g(C_3,\vec{t})\\ &= g(C_2'',\vec{t}+C_3\vec{p}+C_3C_2''\vec{t})=g(C_2'',C_3\vec{p})\end{aligned}$$

其中, 又因为 $\vec{t}$ 沿 $\vec{a}_3$ 方向, $\vec{t}+C_3C_2''\vec{t}=0$. 类似点群 $32'$ 情况, 同样可解得式 (5.80), 于是又得到 $p_1=p_2=0$, p_3 仍可被式 (5.79) 的变换消去.

因此, 当晶格点群是 D_3 群时, 六方晶系 P 型布拉菲格子的空间群有

$$P32', \quad P3_{00\frac{1}{3}}2', \quad P3_{00\frac{2}{3}}2', \quad P32'', \quad P3_{00\frac{1}{3}}2'', \quad P3_{00\frac{2}{3}}2'' \tag{5.81}$$

(2) 对菱方晶系的 R 型布拉菲格子, $\alpha_1=\alpha_2=\alpha_3$, $a_1=a_2=a_3$, 生成元的并矢形式为

$$\vec{\vec{3}}=\vec{a}_2\vec{b}_1+\vec{a}_3\vec{b}_2+\vec{a}_1\vec{b}_3 , \qquad \vec{\vec{2}}'=-\vec{a}_2\vec{b}_1-\vec{a}_1\vec{b}_2-\vec{a}_3\vec{b}_3$$

把坐标原点取在 $g(C_3,\vec{t})$ 的对称直线上, 则

$$\vec{t}=\vec{t}_{\|}=(\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3)m/3$$

其中, $m=0$, 1 或 2. 由于式 (5.72) 中的 $\vec{L}=\vec{\ell}$ 和 $\vec{a}_{\|}=\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3$, 由式 (5.72) 知原点还允许做平移 $\vec{r}_0$, 满足

$$\begin{aligned}\vec{\ell}+(\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3)m'/3&=(C_3-E)\,\vec{r}_0\\ &=\vec{a}_1(-r_{01}+r_{03})+\vec{a}_2(r_{01}-r_{02})+\vec{a}_3(r_{02}-r_{03})\end{aligned}$$

等式右面三个晶格基矢的系数之和为零, 等式左面相应系数之和也必须为零, 于是得 $m'=-\sum_j \ell_j$, 可为任何整数, 由此可把 $\vec{t}$ 化为零. 在这个例子中, 我们看到 $\vec{t}_{\|}$ 被坐标原点的平移消去了. 能消去 $\vec{t}_{\|}$ 的原因是晶格基矢 $\vec{a}_j$ 沿三次转动轴的分量等于 $(\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3)/3$.

在保持 $\vec{t}$ 为零的条件下, 原点还允许做如下进一步平移

$$(C_3-E)\,\vec{r}_0=\vec{a}_1(-r_{01}+r_{03})+\vec{a}_2(r_{01}-r_{02})+\vec{a}_3(r_{02}-r_{03})=\vec{\ell}$$

解得 r_{03} 任意, $r_{01}-r_{03}$ 和 $r_{02}-r_{03}$ 取整数. 这种平移允许 $\vec{p}$ 做如下的改变

$$\begin{aligned}(C_2'-E)\vec{r}_0&=-(\vec{a}_1+\vec{a}_2)(r_{01}+r_{02})-2\vec{a}_3r_{03}\\ &=-(\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3)2r_{03}-(\vec{a}_1+\vec{a}_2)(r_{01}+r_{02}-2r_{03})\end{aligned} \tag{5.82}$$

前项系数任意, 后项系数是整数.

由式 (5.61), $\vec{p}$ 满足

$$(C_2'+E)\vec{p}=(\vec{a}_1-\vec{a}_2)(p_1-p_2)=\vec{\ell}$$

得 $p_1=p_2$. 又由式 (5.73)

$$g(C_2',\vec{p}+\vec{\ell}')=C_3g(C_2',\vec{p})C_3=g(C_2',C_3\vec{p})$$

得

$$\vec{\ell}' = (C_3 - E)\vec{p} = \vec{a}_1(-p_1 + p_3) + \vec{a}_2(p_1 - p_2) + \vec{a}_3(p_2 - p_3)$$

即 $p_1 = p_2 = p_3$, 正好可被式 (5.82) 的变换消去. 因此, 当晶格点群是 D_3 群时, 菱方晶系 R 型布拉菲格子的只有简单空间群 $R32$.

六、空间群的性质

前面我们讨论了对于给定的晶格点群有哪些不同的空间群, 但是从实用上讲, 对我们更重要的还是如何根据晶体的空间群符号, 了解该晶体的对称性质. 这一小节就是要通过一个例子来说明这方法.

设晶体的空间群是

$$I \pm 4_{\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}} 2'_{\frac{1}{2}00}$$

则知它属四方晶系 I 型格子, 晶格点群是 D_{4h}. $\vec{a}_3$ 沿四次轴方向, $\vec{a}_1$ 和 $\vec{a}_2$ 沿两个等价的二次轴方向, $\vec{a}_2 = C_4\vec{a}_1$. 沿另一对二次轴方向的最短晶格矢量为 $\vec{a}_1 \pm \vec{a}_2$, 长度等于 $\sqrt{2}a_1$. 三个晶格基矢互相垂直

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \pi/2 , \qquad a_1 = a_2$$

晶格基矢不是原始的, 可表为晶格基矢非整数线性组合的晶格矢量为

$$\vec{L} = \vec{\ell} + \vec{f} , \qquad \vec{f} = (\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3)/2$$

空间群生成元的并矢形式为

$$\begin{aligned}\vec{\vec{C}}_4 &= \vec{a}_2\vec{b}_1 - \vec{a}_1\vec{b}_2 + \vec{a}_3\vec{b}_3, \\ \vec{\vec{C}}'_2 &= \vec{a}_1\vec{b}_1 - \vec{a}_2\vec{b}_2 - \vec{a}_3\vec{b}_3\end{aligned}$$

空间群元素的一般形式为

$$T(\vec{\ell})T(\vec{f})^{n_1} S_1^{n_2} g\left[C_4, (\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3)/4\right]^m g\left(C'_2, \vec{a}_1/2\right)^{n_3}$$

其中, S_1 是空间反演变换, 原点就在空间反演变换的对称中心. n_1, n_2 和 n_3 取 0 或 1, m 取 0, 1, 2 或 3.

$g(C_4, \vec{q})$ 的转动轴平行于 $\vec{a}_3$ 方向, $\vec{q}_{\parallel} = \vec{a}_3/4$, $\vec{q}_{\perp} = (\vec{a}_1 + \vec{a}_2)/4$. 螺旋轴通过 $\vec{r}_0$ 点, 平行于 $\vec{a}_3$ 方向, $\vec{r}_0$ 可由下式解出

$$(C_4 - E)\vec{r}_0 + \vec{q}_{\perp} = 0 , \qquad r_{01} + r_{02} = -r_{01} + r_{02} = 1/4$$

解得 $r_{01} = 0$, $r_{02} = 1/4$, 即螺旋轴通过 $\vec{a}_2/4$ 点, 平行 $\vec{a}_3$ 方向, 滑移矢量是 $\vec{a}_3/4$.

$g(C_2', \vec{p})$ 的转动轴平行于 $\vec{a}_1$ 方向, $\vec{p}=\vec{p}_{\|}=\vec{a}_1/2$. 因此螺旋轴通过原点, 平行 $\vec{a}_1$ 方向, 滑移矢量是 $\vec{a}_1/2$.

因为 $S_1 g\left(C_2', \vec{a}_1/2\right)=T(\vec{a}_1) g\left(S_2', \vec{a}_1/2\right)$, S_2' 是沿 $\vec{a}_1$ 方向的非固有二次轴转动, $\vec{p}=\vec{p}_{\|}=\vec{a}_1/2$, 因而通过 $\vec{r}_0=\vec{a}_1/4$ 垂直 $\vec{a}_1$ 的平面是对称平面.

在晶胞中任意点 $\vec{r}=\vec{a}_1 x_1+\vec{a}_2 x_2+\vec{a}_3 x_3$, 经对称变换作用, 可得 32 个等价点. 其中在 $g\left[C_4,(\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3)/4\right]^m g\left(C_2', \vec{a}_1/2\right)^{n_3}$ 的作用下得 8 个点

$$
\begin{aligned}
& \vec{r}_1=\vec{a}_1 x_1+\vec{a}_2 x_2+\vec{a}_3 x_3, \\
& \vec{r}_2=\vec{a}_1\left(-x_2+1/4\right)+\vec{a}_2\left(x_1+1/4\right)+\vec{a}_3\left(x_3+1/4\right), \\
& \vec{r}_3=-\vec{a}_1 x_1+\vec{a}_2\left(-x_2+1/2\right)+\vec{a}_3\left(x_3+1/2\right), \\
& \vec{r}_4=\vec{a}_1\left(x_2-1/4\right)+\vec{a}_2\left(-x_1+1/4\right)+\vec{a}_3\left(x_3+3/4\right), \\
& \vec{r}_5=\vec{a}_1\left(x_1+1/2\right)-\vec{a}_2 x_2-\vec{a}_3 x_3, \\
& \vec{r}_6=\vec{a}_1\left(x_2+1/4\right)+\vec{a}_2\left(x_1+3/4\right)+\vec{a}_3\left(-x_3+1/4\right), \\
& \vec{r}_7=\vec{a}_1\left(-x_1+1/2\right)+\vec{a}_2\left(x_2+1/2\right)+\vec{a}_3\left(-x_3+1/2\right), \\
& \vec{r}_8=\vec{a}_1\left(-x_2-1/4\right)+\vec{a}_2\left(-x_1+3/4\right)+\vec{a}_3\left(-x_3+3/4\right)
\end{aligned}
$$

再用 $T(\vec{f})$ 和 S_1 作用, 可得全部 32 个等价点.

*5.5 空间群的线性表示

本节讨论空间群的不等价不可约表示. 平移群 $\mathcal{T}$ 是空间群 $\mathcal{S}$ 的阿贝尔不变子群, 只有一维不可约表示. 通过选择表象, 让空间群不可约表示关于平移群的分导表示是对角化的, 然后证明陪集元素的表示矩阵仅依赖于所谓波矢群的不可约表示. 本书只讨论大部分情况下的波矢群不可约表示. 最后讨论简单空间群不可约表示的函数基. 更一般的情况, 请读者参考有关专著.

一、平移群的不可约表示

实际的晶体是有限的, 因此不可能有严格的平移不变性 (见文献 [69]). 通常解决的办法是, 设想晶体在边界上满足周期性的边界条件, 从而恢复平移不变性, 而且平移群 $\mathcal{T}$ 成为有限群. 为解说方便起见, 本节重新假设晶格基矢是原始的, 所有晶格矢量都是晶格基矢的整数线性组合.

以三个晶格基矢为边构成的平行六面体是晶格的原胞. 设晶体在三个晶格基矢方向的原胞数分别是 N_1, N_2 和 N_3, 这三个 N_j 都是很大的有限数, 且无公约数, 则沿晶格基矢 $\vec{a}_j$ 方向的任何平移变换, 自乘 N_j 次后是恒元. 晶体的任何平移变换自乘 $(N_1N_2N_3)$ 次后也是恒元. 因此, 平移群是有限的阿贝尔群, 它的不等价不可约表示都是一维的幺正表示. 当 N_j 趋于无穷大时, 有限晶体接近于无限的理想晶体.

设 $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ 和 $\vec{a}_3$ 是晶体的一组原始的晶格基矢, $\vec{b}_1$, $\vec{b}_2$ 和 $\vec{b}_3$ 是相应的倒晶格基矢, $\vec{\ell}$ 是晶格矢量, $\vec{K}$ 是倒晶格矢量

$$\begin{aligned}\vec{\ell} &= \vec{a}_1\ell_1 + \vec{a}_2\ell_2 + \vec{a}_3\ell_3, \\ \vec{K} &= \vec{a}_1K_1 + \vec{a}_2K_2 + \vec{a}_3K_3\end{aligned} \tag{5.83}$$

$$\vec{K} \cdot \vec{\ell} = \sum_j K_j\ell_j = \text{整数} \tag{5.84}$$

其中, ℓ_j 和 K_j 都是整数. 因此,

$$\left(R\vec{K}\right) \cdot \vec{\ell} = \vec{K} \cdot \left(R^{-1}\vec{\ell}\right) = \vec{K} \cdot \vec{\ell}' = \text{整数} \tag{5.85}$$

经过晶格点群元素 R 变换, 晶格矢量仍变成晶格矢量, 倒晶格矢量也变成倒晶格矢量, 晶格点群和倒晶格点群是一样的.

晶格平移群 $\mathcal{T}$ 是沿三个晶格基矢方向平移群的直乘

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}^{(1)} \otimes \mathcal{T}^{(2)} \otimes \mathcal{T}^{(3)} \tag{5.86}$$

以沿 $\vec{a}_1$ 方向的平移群 $\mathcal{T}^{(1)}$ 为例, 它是 N_1 阶循环群, 有 N_1 个一维不等价不可约表示, 用 $k_1 = p_1/N_1$ 标记, 其中 p_1 是整数, $0 \leqslant p_1 < N_1$. 平移 $\vec{a}_1\ell_1$ 的变换在这表示中的表示矩阵为

$$D^{k_1}\left(\vec{a}_1\ell_1\right) = \exp\left(-\mathrm{i}2\pi p_1\ell_1/N_1\right) = \exp\left(-\mathrm{i}2\pi k_1\ell_1\right) \tag{5.87}$$

因此, 平移群 $\mathcal{T}$ 有 $(N_1N_2N_3)$ 个一维不等价不可约表示, 它们用 k_1, k_2 和 k_3, 或用矢量 $\vec{k}$ 来标记. $\mathcal{T}$ 群元素 $T(\vec{\ell})$ 在此表示中的表示矩阵是

$$D^{\vec{k}}(\vec{\ell}) = \exp\left(-\mathrm{i}2\pi\sum_{j=1}^{3} k_j\ell_j\right), \qquad 0 \leqslant k_j < 1 \tag{5.88}$$

$\vec{k}$ 是倒晶格空间的矢量

$$\vec{k} = \sum_{j=1}^{3} \vec{b}_jk_j\ , \qquad k_j = p_j/N_j \tag{5.89}$$

在上述区域内, k_j 有 N_j 个不同取值. 当 N_j 趋于无穷大时, 区域内的每一点对应平移群 $\mathcal{T}$ 的一个不等价不可约表示. 如果 k_j 变化一个整数, $\vec{k}$ 矢量变化一个倒晶格矢量, 这对式 (5.88) 的表示没有影响. 倒晶格空间任意相差倒晶格矢量的两点称为等价点, 它们描写同一个不可约表示.

通常把 $\vec{k}$ 矢量称为波矢, 倒晶格空间称为 $\vec{k}$ 空间或波矢空间. 当 N_j 足够大时, $\vec{k}$ 空间每一点都对应平移群 $\mathcal{T}$ 的一个不可约表示. $\vec{k}$ 空间相差倒晶格矢量的两点是等价点, 对应同一个不可约表示, 因而 $\vec{k}$ 空间也存在着平移不变性. $\vec{k}$ 空间的原胞内的点与平移群的不可约表示有一一对应的关系, 边界上的点可能互相等价, 对应同一个不可约表示. 式 (5.88) 给出的 $\vec{k}$ 矢量变化区域满足原胞的性质, 但使用起来不方便, 因为区域内的点通过点群元素的变换, 可能变到区域外面去. 固体物理中引入布里渊区 (Brillouin zone) 作为波矢空间的原胞. 原点和各倒晶格点连线的垂直平分面称为布拉格 (Bragg) 面. 布拉格面与实验上衍射极大现象有关. 布里渊区就是由这些布拉格面围成的特定区域. 波矢空间内由最靠近原点的布拉格面围成的区域称为第一布里渊区. 由第一布里渊区往外到达另一个布拉格面的区域组成第二布里渊区, 依此类推. 除第一布里渊区外, 其他布里渊区并不是一个连通区域, 它们由若干个连通区域构成, 这些连通区域分别经过平移倒晶格矢量后可以拼成第一布里渊区. 因此各布里渊区的体积相等, 每个布里渊区内包含的波矢数都等于晶体中的原胞数 $(N_1N_2N_3)$. 在每个布里渊区内部的点经点群元素的变换仍在区域内, 边界上的点经变换后仍在边界上. 在布里渊区内的点与平移群的不可约表示有一一对应的关系, 在布里渊区边界上可能有等价点, 即不同点对应同一个不可约表示.

二、波矢星和波矢群

设 $D(\mathcal{S})$ 是空间群 $\mathcal{S}$ 的一个 m 维不可约幺正表示, 选取表象, 使它关于平移群 $\mathcal{T}$ 的分导表示取已约形式

$$D(E,\vec{\ell}) = \text{diag}\left\{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi\vec{k}_1\cdot\vec{\ell}},\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi\vec{k}_2\cdot\vec{\ell}},\ \cdots,\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi\vec{k}_m\cdot\vec{\ell}}\right\} \tag{5.90}$$

注意, 这里 $\vec{k}_\rho$ 的下标不是矢量的分量指标, 而是区分这些矢量的指标, 不要混淆. 暂时并不规定不同下标的 $\vec{k}_\rho$ 一定不相等, 因而 ρ 也起到表示矩阵 $D(\mathcal{S})$ 的行列指标的作用.

平移群是空间群的不变子群, 平移变换的共轭变换仍是平移变换

$$\begin{aligned} g(R,\vec{\alpha})^{-1}g(E,\vec{\ell})g(R,\vec{\alpha}) &= g(E,R^{-1}\vec{\ell}), \\ D(E,\vec{\ell})D(R,\vec{\alpha}) &= D(R,\vec{\alpha})D(E,R^{-1}\vec{\ell}) \end{aligned} \tag{5.91}$$

由于式 (5.85), 这共轭变换把对角元指数上的 $\vec{k}_\rho$ 矢量变成 $R\vec{k}_\rho$. 因为相似变换不改变矩阵的本征值, 所以 $R\vec{k}_\rho$ 必须等价于式 (5.90) 中的某一个 $\vec{k}_\tau$, 即它们至多相差一个倒晶格矢量

$$R\vec{k}_\rho = \vec{k}_\tau + \vec{K} \tag{5.92}$$

这倒晶格矢量不影响指数值. 在第一布里渊区内, 可以由晶格点群元素按式 (5.92) 相联系的波矢称为互相共轭的波矢, 互相共轭波矢的集合称为波矢星, 不相等的互

相共轭的波矢数目称为波矢星的支, 记作 q. 波矢星中各波矢的地位是平等的, 它们都可以互相通过点群元素联系起来.

式 (5.91) 表明, 表示矩阵 $D(R,\vec{\alpha})$ 从左面和右面分别乘两个不同的对角矩阵后要相等. 写成矩阵元素形式有

$$\exp\left\{-\mathrm{i}2\pi\vec{k}_\tau\cdot\vec{\ell}\right\}\ D_{\tau\rho}(R,\vec{\alpha})=D_{\tau\rho}(R,\vec{\alpha})\ \exp\left\{-\mathrm{i}2\pi\left(R\vec{k}_\rho\right)\cdot\vec{\ell}\right\} \tag{5.93}$$

因此, 矩阵元素 $D_{\tau\rho}(R,\vec{\alpha})$ 不为零的条件正是式 (5.92). 显然, 由于表示 $D(\mathcal{S})$ 是不可约的, 对式 (5.90) 的任何两个波矢 $\vec{k}_\rho$ 和 $\vec{k}_\tau$ 必须互相共轭, 即至少存在一个晶格点群元素 R 满足式 (5.92). 如若不然, 则波矢至少分成两组, 一组中的波矢与 $\vec{k}_\rho$ 共轭, 另一组中的波矢与 $\vec{k}_\tau$ 共轭, 它们之间则互不共轭, 于是空间群所有元素 $g(R,\vec{\alpha})$ 在此表示中的表示矩阵, 凡涉及不同组的矩阵元素 $D_{\tau\rho}(R,\vec{\alpha})$ 都为零, 即表示是可约表示.

现在, 我们通过简单相似变换 (基的重新排列), 把式 (5.90) 中相同的对角元排在一起, 下标不同的 $\vec{k}_\mu$ 互不相等

$$D(E,\vec{\ell})=\mathrm{diag}\left\{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi\vec{k}_1\cdot\vec{\ell}},\cdots,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi\vec{k}_1\cdot\vec{\ell}},\cdots,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi\vec{k}_q\cdot\vec{\ell}},\cdots,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi\vec{k}_q\cdot\vec{\ell}}\right\}$$

其中, 共出现 q 个不同的 $\vec{k}_\mu$, $1\leqslant\mu\leqslant q$. 正因为相似变换不改变矩阵的本征值, 所以由式 (5.93), 每个 $\vec{k}_\mu$ 出现的重数 d 都相同

$$m=qd \tag{5.94}$$

空间群的每一个不可约表示都对应一个确定的波矢星, 表示的维数 m 与波矢星的支数 q 满足式 (5.94).

任选一个波矢, 例如选 $\vec{k}_1$, 通过点群元素 R_μ 的作用, $\vec{k}_1$ 变成了 $\vec{k}_\mu$

$$R_\mu\vec{k}_1=\vec{k}_\mu\ \ \text{或}\qquad\vec{k}_\mu+\vec{K}_\mu \tag{5.95}$$

晶格点群中也会存在若干个满足下式的元素 P

$$P\vec{k}_1=\vec{k}_1\ \ \text{或}\qquad\vec{k}_1+\vec{K}_P \tag{5.96}$$

只有当波矢星在布里渊区的边界上时, 式 (5.95) 和 (5.96) 中才会出现不为零的倒晶格矢量 $\vec{K}_\mu$ 和 $\vec{K}_P$. 这样的 P 称为保持 $\vec{k}_1$ 不变的变换. 点群 G 中保持 $\vec{k}_1$ 不变的变换集合构成 G 的子群, 记作 $H(\vec{k}_1)$. 它的左陪集 $R_\mu H(\vec{k}_1)$ 中的任一元素都满足式 (5.95), 反之, 满足式 (5.95) 的点群元素都在此左陪集中. 在群 G 中子群 $H(\vec{k}_1)$ 的指数等于波矢星的支 q. R_μ 的选择有一定的任意性, 但它的选择并不影响以后的讨论. 现在开始, 我们认为 R_μ 已经按式 (5.95) 选定, 而且令 $R_1=E$. 这样, 点群 G 的元素都可表成 $R_\mu P$ 的形式.

与子群 $H(\vec{k}_1)$ 元素 P 相对应的空间群元素为 $g(P,\vec{\alpha})$, 所有这样的元素集合构成空间群 $\mathcal{S}$ 的子群, 记作 $\mathcal{S}(\vec{k}_1)$, 称为与波矢 $\vec{k}_1$ 相联系的空间群, 简称波矢群. 在空间群 $\mathcal{S}$ 中, 波矢群的指数也等于波矢星的支 q. 平移群 $\mathcal{T}$ 也是波矢群的不变子群, 商群 $\mathcal{S}(\vec{k}_1)/\mathcal{T}$ 与 $H(\vec{k}_1)$ 同构.

三、空间群元素的表示矩阵

本小节对给定波矢星研究空间群的不可约表示的一般形式. 设空间群不可约幺正表示 $D(\mathcal{S})$ 是 $m=qd$ 维的, 将空间群任意元素 $g(R,\vec{\alpha})$ 在此表示中的表示矩阵 $D(R,\vec{\alpha})$, 分割成 q^2 个 $d\times d$ 小矩阵 $D_{\mu\nu}(R,\vec{\alpha})$, 这些小矩阵排列起来, 构成 $q\times q$ 方矩阵

$$D(R,\vec{\alpha})=\begin{pmatrix} D_{11}(R,\vec{\alpha}) & D_{12}(R,\vec{\alpha}) & \cdots & D_{1q}(R,\vec{\alpha}) \\ D_{21}(R,\vec{\alpha}) & D_{22}(R,\vec{\alpha}) & \cdots & D_{2q}(R,\vec{\alpha}) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ D_{q1}(R,\vec{\alpha}) & D_{q2}(R,\vec{\alpha}) & \cdots & D_{qq}(R,\vec{\alpha}) \end{pmatrix} \tag{5.97}$$

下面将证明, $D(R,\vec{\alpha})$ 的每一列 (行) 都只有一个小矩阵不为零, 我们要讨论这不为零的小矩阵的位置和性质. 首先, 已经知道平移变换的表示矩阵是对角矩阵

$$D_{\mu\nu}(E,\vec{\ell})=\mathbf{1}_d\delta_{\mu\nu}\exp\left(-\mathrm{i}2\pi\vec{k}_\mu\cdot\vec{\ell}\right) \tag{5.98}$$

其中, $\mathbf{1}_d$ 是 d 维单位矩阵.

第二, 讨论 $g(R_\mu,\vec{t}_\mu)$ 的表示矩阵. 把式 (5.97) 代入式 (5.93), 得

$$\exp\left\{-i2\pi\vec{k}_\nu\cdot\vec{\ell}\right\}\ D_{\nu1}(R_\mu,\vec{t}_\mu)=D_{\nu1}(R_\mu,\vec{t}_\mu)\ \exp\left\{-\mathrm{i}2\pi\left(R_\mu\vec{k}_1\right)\cdot\vec{\ell}\right\}$$

于是, 第一列的小矩阵中只有 μ 行不为零

$$D_{\nu1}(R_\mu,\vec{t}_\mu)=\delta_{\nu\mu}D_{\mu1}(R_\mu,\vec{t}_\mu) \tag{5.99}$$

$D_{\mu1}(R_\mu,\vec{t}_\mu)$ 是幺正矩阵.

到现在为止, 我们仅规定了 $D(E,\vec{\ell})$ 的具体形式, 表示 $D(\mathcal{S})$ 还允许做与 $D(E,\vec{\ell})$ 对易的任意相似变换. 现选幺正相似变换 X 来简化 $D(R_\mu,\vec{t}_\mu)$

$$X=\bigoplus_\mu X_\mu\ ,\qquad X_\mu=\begin{cases}\mathbf{1}_d, & 当\ \ \mu=1\\ D_{\mu1}(R_\mu,\vec{t}_\mu), & 当\ \ \mu\neq 1\end{cases} \tag{5.100}$$

变换后的表示仍记作 D, $D(E,\vec{\ell})$ 仍取式 (5.98) 的形式, 但

$$D_{\nu1}(R_\mu,\vec{t}_\mu)=\mathbf{1}_d\delta_{\mu\nu} \tag{5.101}$$

由于表示的幺正性, 第 μ 行的小矩阵中只有第一列不为零

$$D_{\mu\nu}(R_\mu, \vec{t}_\mu) = \mathbf{1}_d \delta_{1\nu} \tag{5.102}$$

第三, 通过类似的讨论, 由式 (5.93) 可得 $g(P, \alpha)$ 的表示矩阵满足

$$\begin{aligned} D_{\nu 1}(P, \vec{\alpha}) &= \delta_{\nu 1} D_{11}(P, \vec{\alpha}), \\ D_{1\nu}(P, \vec{\alpha}) &= \delta_{1\nu} D_{11}(P, \vec{\alpha}) \end{aligned} \tag{5.103}$$

最后, 计算元素 $g(R, \vec{t})$ 表示矩阵的第 μ 列小矩阵 $D_{\rho\mu}(R, \vec{t})$, 其中 μ 是任意的, 但已选定. 把 R 左乘到 R_μ 上, 它仍是点群 G 的元素, 设表为 $R_\nu P$, 则

$$RR_\mu = R_\nu P \ , \qquad g(R, \vec{t}) = g(R_\nu, \vec{t}_\nu) g(P, \vec{\alpha}) g(R_\mu, \vec{t}_\mu)^{-1} \tag{5.104}$$

对于给定的空间群 $\mathcal{S}$, 选定了 R 和 R_μ 后, $\vec{t}$, $\vec{t}_\mu$, R_ν, $\vec{t}_\nu$, P 和 $\vec{\alpha}$ 都跟着确定. 计算元素 $g(R, \vec{t})$ 表示矩阵的 ν 行 μ 列元素

$$D_{\nu\mu}(R, \vec{t}) = \sum_{\tau\lambda} D_{\nu\tau}(R_\nu, \vec{t}_\nu) D_{\tau\lambda}(P, \vec{\alpha}) D_{\mu\lambda}(R_\mu, \vec{t}_\mu)^* = D_{11}(P, \vec{\alpha}) \tag{5.105}$$

又由表示的幺正性得

$$D_{\rho\mu}(R, \vec{t}) = \delta_{\rho\nu} D_{11}(P, \vec{\alpha}) \ , \qquad D_{\nu\rho}(R, \vec{t}) = \delta_{\rho\mu} D_{11}(P, \vec{\alpha}) \tag{5.106}$$

因此, 我们证明了 $D(R, \vec{t})$ 矩阵的每一列 (行) 都只有一个小矩阵不为零, 而且这小矩阵可由 $D_{11}(P, \vec{\alpha})$ 表出. 空间群 $\mathcal{S}$ 的一般元素在表示 $D(\mathcal{S})$ 中的表示矩阵, 完全由波矢群的不可约表示 $D_{11}(P, \vec{\alpha})$ 决定.

四、波矢群的不可约表示

我们首先证明, 空间群的表示 $D(\mathcal{S})$ 不可约的充要条件是波矢群的表示 $D_{11}(P, \vec{\alpha})$ 不可约. 如果 D_{11} 表示可约, 存在非常数矩阵 Y 与所有的 $D_{11}(P, \vec{\alpha})$ 矩阵对易, 则 $X = \mathbf{1}_q \times Y$ 可与所有的 $D(R, \vec{t})$ 和 $D(E, \vec{\ell})$ 对易, 即表示 $D(\mathcal{S})$ 可约. 反之, 如果表示 $D(\mathcal{S})$ 可约, 则存在非常数矩阵 X 与它的所有表示矩阵对易. 因与 $D(E, \vec{\ell})$ 对易, X 只能取 $\bigoplus_\mu Y_\mu$ 的形式, 其中 Y_μ 都是 d 维矩阵. 又因 X 与 $D(R_\mu, \vec{t}_\mu)$ 对易, 则所有 Y_μ 相同, 且与 $D_{11}(P, \vec{\alpha})$ 对易. 既然 Y_μ 不是常数矩阵, 表示 $D_{11}(P, \vec{\alpha})$ 是可约的. 证完.

其次, 就两种情况计算表示矩阵 $D_{11}(P, \vec{\alpha})$ 的具体形式, 一是波矢星在第一布里渊区内, 二是波矢星在第一布里渊区边界上, 但 $\mathcal{S}$ 是简单空间群.

取点群 $H(\vec{k}_1)$ 的不可约表示 $\Gamma(H)$, 可证在上述两种情况下

$$D_{11}(P, \vec{\alpha}) = \exp\left(-\mathrm{i}2\pi \vec{k}_1 \cdot \vec{\alpha}\right) \Gamma(P) \tag{5.107}$$

构成波矢群 $\mathcal{S}(\vec{k}_1)$ 的不可约表示. 对每一个给定的波矢 $\vec{k}_1$, 式 (5.107) 给出的不等价不可约表示个数等于点群 $H(\vec{k}_1)$ 的类数.

把式 (5.107) 与波矢群元素 $g(P,\vec{\alpha})$ 对应起来, 对于群元素的乘积

$$g(P,\vec{\alpha})g(P',\vec{\alpha}')=g(PP',\vec{\alpha}+P\vec{\alpha}')$$

要证明它们的乘积仍按同一规则对应

$$D_{11}(P,\vec{\alpha})D_{11}(P',\vec{\alpha}')=D_{11}(PP',\vec{\alpha}+P\vec{\alpha}') \tag{5.108}$$

因为 $\Gamma(P)\Gamma(P')=\Gamma(PP')$, 所以问题的关键是等式两边的指数函数部分是否相等. 式 (5.108) 左边的指数函数为

$$\exp\left[-\mathrm{i}2\pi\vec{k}_1\cdot(\vec{\alpha}+\vec{\alpha}')\right]$$

式 (5.108) 右边的指数函数为

$$\exp\left[-\mathrm{i}2\pi\vec{k}_1\cdot(\vec{\alpha}+P\vec{\alpha}')\right]=\exp\left(-\mathrm{i}2\pi\vec{k}_1\cdot\vec{\alpha}\right)\exp\left[-\mathrm{i}2\pi(P^{-1}\vec{k}_1)\cdot\vec{\alpha}'\right]$$

当波矢星在第一布里渊区内时, $P^{-1}\vec{k}_1=\vec{k}_1$, 式 (5.108) 成立. 当 $\mathcal{S}$ 是简单空间群时, $\vec{\alpha}'=\vec{\ell}$, 即使波矢星在第一布里渊区的边界上, $P^{-1}\vec{k}_1=\vec{k}_1+\vec{K}$, 这倒晶格矢量 $\vec{K}$ 也不起作用

$$\exp\left(-\mathrm{i}2\pi\vec{K}\cdot\vec{\ell}\right)=1$$

因而式 (5.108) 依然成立. 证完.

对一般空间群 $\mathcal{S}$, 波矢星又在第一布里渊区边界上的情况, 波矢群不可约表示的形式比较复杂. 这里不再讨论. 可以证明, 对给定的波矢星, 取其他 $\vec{k}_\mu$ 代替 $\vec{k}_1$, 得到的表示与上面表示等价.

总之, 空间群 $\mathcal{S}$ 的不可约表示 D 以波矢星和 $H(\vec{k}_1)$ 的不可约表示 $\Gamma(H)$ 共同标记, 它的维数 $m=qd$, q 是波矢星的支, d 是表示 Γ 的维数. 在这表示中, 平移群元素的表示矩阵是对角化的 (如式 (5.98) 所示), 陪集元素 $g(R,\vec{t})$ 的表示矩阵可表为由 q^2 个 d 维小矩阵排列成的 $q\times q$ 方矩阵 (如式 (5.97) 所示), 而且每一行和每一列中只有一个小矩阵不为零, 不为零的小矩阵通过式 (5.105) 与波矢群的表示 $D_{11}(P,\vec{\alpha})$ 相联系, 后者由式 (5.107) 给出.

五、布洛赫定理

设空间群 $\mathcal{S}$ 是晶体的对称变换群, 则在晶格场中运动的电子, 它的定态波函数属空间群 $\mathcal{S}$ 不可约表示. 现在我们来讨论这样的波函数的性质.

设 $\psi_{1m}(\vec{r})$ 是按波矢群 $\mathcal{S}(\vec{k}_1)$ 不可约表示 $D_{11}(P,\vec{\alpha})$ 变换的函数基

$$P_{g(P,\vec{\alpha})}\psi_{1m}(\vec{r}) = \sum_{m'} \psi_{1m'}(\vec{r}) \{D_{11}(P,\vec{\alpha})\}_{m'm} \tag{5.109}$$

对平移变换

$$P_{g(E,\vec{\ell})}\psi_{1m}(\vec{r}) = \psi_{1m}(\vec{r}-\vec{\ell}) = \psi_{1m}(\vec{r})\exp\left(-\mathrm{i}2\pi\vec{k}_1\cdot\vec{\ell}\right) \tag{5.110}$$

可见

$$\psi_{1m}(\vec{r}) = \exp\left(\mathrm{i}2\pi\vec{k}_1\cdot\vec{r}\right)u_m(\vec{r}), \qquad u_m(\vec{r}-\vec{\ell}) = u_m(\vec{r}) \tag{5.111}$$

把函数基扩充. 令

$$\begin{aligned}\psi_{\mu m}(\vec{r}) &= P_{R_\mu}\psi_{1m}(\vec{r}) = \psi_{1m}(R_\mu^{-1}\vec{r}) = \exp\left\{\mathrm{i}2\pi\vec{k}_1\cdot\left(R_\mu^{-1}\vec{r}\right)\right\}u_m(R_\mu^{-1}\vec{r}) \\ &= \exp\left\{\mathrm{i}2\pi\left(R_\mu\vec{k}_1\right)\cdot\vec{r}\right\}P_{R_\mu}u_m(\vec{r})\end{aligned} \tag{5.112}$$

$$P_{R_\mu}u_m(\vec{r}-\vec{\ell}) = u_m(R_\mu^{-1}\vec{r}-R_\mu^{-1}\vec{\ell}) = u_m(R_\mu^{-1}\vec{r}-\vec{\ell}') = P_{R_\mu}u_m(\vec{r})$$

我们要证明这组基在空间群变换下, 正是按不可约表示 $D(\mathcal{S})$ 变换.

首先, 式 (5.112) 的波函数 $\psi_{\mu m}(\vec{r})$ 正是按照式 (5.101) 的要求来定义的, 它显然满足, 从而式 (5.102)、(5.105) 和 (5.106) 也满足. 其次, 对平移变换

$$\begin{aligned}P_{g(E,\vec{\ell})}\psi_{\mu m}(\vec{r}) &= \psi_{\mu m}(\vec{r}-\vec{\ell}) = \exp\left\{-\mathrm{i}2\pi\left(R_\mu\vec{k}_1\right)\cdot\vec{\ell}\right\}\psi_{\mu m}(\vec{r}) \\ &= \exp\left\{-\mathrm{i}2\pi\vec{k}_\mu\cdot\vec{\ell}\right\}\psi_{\mu m}(\vec{r})\end{aligned} \tag{5.113}$$

可见式 (5.98) 是满足的. 如果 $\psi_{1m}(\vec{r})$ 是哈密顿量的本征函数, 则 $m = qd$ 个函数 $\psi_{\mu m}(\vec{r})$ 就是晶体哈密顿量的同一能级的简并化的本征函数.

式 (5.112) 正是固体物理中的布洛赫 (Bloch) 定理. 布洛赫 (Bloch) 定理 (例如见文献 [14] 第 211 页) 说, 在具有平移不变性 T 的势场 $V(\vec{r})$ 中运动的电子的定态波函数 $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ 满足

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}, \qquad u_{\vec{k}}(\vec{r}-\vec{\ell}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) \tag{5.114}$$

六、晶体中电子的能带

现在我们来讨论晶体中电子能量随波矢 $\vec{k}$ 的变化. 采用自由电子近似, 电子近似地在平均场 V_0 中运动, V_0 与 $\vec{r}$ 无关, 势场 $V(\vec{r})$ 在平均势场附近涨落, 涨落的势场 $V_1(\vec{r}) = V(\vec{r}) - V_0$, 满足空间群 $\mathcal{S}$ 对称性, 可以做微扰处理. 电子的哈密顿量表为

$$H(\vec{r}) = H_0(\vec{r}) + V_1(\vec{r}), \qquad H_0(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + V_0 \tag{5.115}$$

其中, m_e 是电子质量. 如果能级是正则简并的, 则能量的本征函数属空间群确定的不可约表示, 波函数由式 (5.112) 给出. 不同的 μ 和 m 对应相同的能量. 选 $\mu=1$, 并为了简化符号, 把固定的下标 μ 和 m 都省略, 把 $\vec{k}_1$ 记作 $\vec{k}$. 现在由式 (5.111) 给出的定态波函数是 $\vec{k}$ 的函数, 表示为

$$\psi(\vec{r})=\exp\left(\mathrm{i}2\pi\vec{k}\cdot\vec{r}\right)u(\vec{r}),\qquad u(\vec{r}-\vec{\ell})=u(\vec{r}) \tag{5.116}$$

由于后式, 波函数 u 部分可按倒晶格矢量 $\vec{K}_n$ 做傅里叶展开

$$\begin{aligned}u(\vec{r})&=\sum_n u_n\exp\left(-\mathrm{i}2\pi\vec{K}_n\cdot\vec{r}\right)\\ \psi(\vec{r})&=\sum_n u_n\exp\left\{\mathrm{i}2\pi\left(\vec{k}-\vec{K}_n\right)\cdot\vec{r}\right\}\end{aligned} \tag{5.117}$$

其中, u_n 是待定常数. 求和式中的每一项, 即只有一个 u_n 不为零的波函数, 正是哈密顿量 H_0 的本征函数, 是零级波函数, 分别对应零级能量 E_n

$$E_n=\frac{\hbar}{2m_e}\left(\vec{k}-\vec{K}_n\right)^2+V_0 \tag{5.118}$$

零级能量随波矢 $\vec{k}-\vec{K}_n$ 连续变化. 如果我们要计算 $n=0$ 的态的能量修正, 则 u_0 是主要的. 因为 V_1 在波函数中的平均值已经以平均场的形式提出去了, 所以能量的一级微扰为零. 不同 $\vec{k}$ 的波函数属于空间群不等价的不可约表示或属于同一个不可约表示 ($\vec{k}$ 属同一个波矢星), 在对称微扰作用下, 波函数不混合. 只有当能级出现新的简并, 需要用有简并的微扰方法来处理时, 能级才会分裂, 能量才会出现明显变化.

当 $\vec{k}$ 在第一布里渊区中心附近时, 能级没有新的简并, 能量差 E_n-E_0 比较大, 因此其他 u_n 相对 u_0 都很小, 能量是随波矢 $\vec{k}^2$ 连续变化的. 但在第一布里渊区的边界上, $\vec{k}^2$ 和 $\left(\vec{k}-\vec{K}_n\right)^2$ 有可能相等, 产生新的能级简并. 因此在第一布里渊区的边界附近, 式 (5.117) 至少有两项大小可以比拟, 发生强烈干涉. 能量微扰的结果, 一个能级抬高, 另一个能级降低, 形成能隙. 这种现象在其他布里渊区的边界上也会发生. 这就是晶体中能带形成的基本原理. 当然实际问题还要复杂得多, 例如不同能带有可能互相重迭, 使能隙 (禁带) 变窄, 甚至消失. 想要进一步了解这方面的内容, 请读者参考固体物理有关书籍.

顺便我们看到, 布里渊区边界的条件是

$$\vec{k}^2=\left(\vec{k}-\vec{K}\right)^2$$

解得

$$2\vec{k}\cdot\vec{K}=\vec{K}^2 \tag{5.119}$$

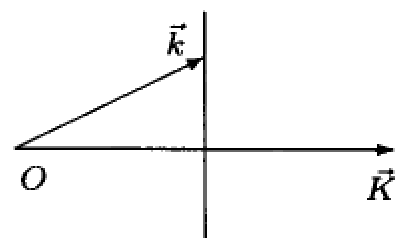


图 5.2 布拉格面

这正是倒晶格矢量垂直平分面的方程, 这垂直平分面在固体物理中称为布拉格(Bragg) 面 (如图 5.2), 各布里渊区正是用布拉格面来分隔的.

习　题

1. 在直角坐标系中, 写出沿 x_3 方向的六次固有和非固有循环群生成元的并矢形式和矩阵形式.

2. 用直角坐标系的单位矢量表出 T_d 群和 O_h 群的各固有和非固有转动轴的方位.

3. 设 R 是绕 $\hat{n}=(\vec{e}_1+\vec{e}_2)/\sqrt{2}$ 方向转动 $2\pi/3$ 角的变换, 试找出 $g(R,\vec{t})$ 的对称直线位置, 其中 (1) $\vec{t}=\vec{e}_3$, (2) $\vec{t}=\vec{e}_1+\vec{e}_3$. 如果它是螺旋轴, 请指出沿轴向的滑移矢量, 并通过坐标原点的平移, 把 g 化为标准形式以检验此结论.

4. 设 S_2 是对 x_1x_2 平面的反射变换, 找出 $g(S_2,\vec{t})$ 的对称平面位置, 其中 (1) $\vec{t}=\vec{e}_3$, (2) $\vec{t}=\vec{e}_1+\vec{e}_3$. 如果它是滑移平面, 请指出沿平面的滑移矢量, 并通过坐标原点的平移, 把 g 化为标准形式以检验此结论.

5. 试分析第 52 号 (D_{2h}^6), 第 161 号 (C_{3v}^6) 和第 199 号 (T^5) 空间群的对称性质, 指出: (1) 一般元素的表达式, (2) 三个晶格基矢的方向和相互间长度的关系, (3) 各生成元的对称直线或对称平面的方位, 如有螺旋轴或滑移平面, 请指出它们的滑移矢量, (4) 在一个晶胞内找出任意点 $\vec{r}=\vec{a}_1x_1+\vec{a}_2x_2+\vec{a}_3x_3$ 的等价点位置.

6. 试由点群 D_{2d} 出发, 计算全部 12 种空间群.

7. 试由点群 D_2 出发, 计算全部 9 种空间群.

*第六章 置 换 群

置换群描写全同粒子体系的置换对称性. 在置换群理论中发展起来的一套杨算符方法, 在近代物理中得到了广泛的应用. 例如, 近代物理中广泛使用着张量的概念, 而张量指标间的复杂对称性质, 必须用杨算符才能给出明确的描写. 从数学上说, 置换群是一类十分重要的有限群, 因为所有有限群都同构于置换群的子群. 用杨算符的方法研究置换群的表示理论, 本身是一个非常美的理论, 只通过几个简单的定理, 就可以严格而系统地建立起置换群的整个表示理论, 包括计算置换群元素的具体表示矩阵和置换群表示外积的概念.

6.1 置换群的一般性质

在这一节, 我们首先介绍置换 (permutation)、轮换 (cycle)、对换 (transposition)、偶置换和奇置换等基本概念, 然后讨论轮换的乘积公式、置换群的类、生成元和交换子群等置换群的一般性质.

一、置换

n 个客体排列次序的变换称为置换. 设原来排在第 j 位置的客体, 经过置换 R 后排到了第 r_j 位置, 用一个 $2\times n$ 矩阵来描写这一置换 R

$$R=\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & n\\ r_1 & r_2 & \cdots & r_n\end{pmatrix} \tag{6.1}$$

对一个给定的置换, 式 (6.1) 中各列的排列次序是无关紧要的, 重要的是每一列上下两个数字的对应关系, 也就是各客体在变换前后所处的位置关系. 因此式 (6.1) 中各列次序可以任意交换, 例如

$$R=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4 & 5\\ 3 & 4 & 5 & 2 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}5 & 4 & 1 & 2 & 3\\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5\end{pmatrix} \tag{6.2}$$

今后, 常把以数字标记的客体间的置换, 简单地说成数字间的置换. 这样的说法通常不会引起混淆.

两个置换的乘积定义为相继做两次置换. 例如, 乘积 SR, 先做 R 置换, 客体位置按式 (6.1) 做了重新排列, 然后客体在此新排列的基础上再做 S 变换. 在做 S 变换时, 把新排列中第 j 位置的客体移到第 s_j 位置去, 而不管这第 j 位置的客体原先在 R 变换之前是排在什么位置. 这正是全同粒子体系的实际情况. 粒子经过置换以后, 只知道目前粒子排在什么位置, 而“忘却”了变换前它排在什么位置. 按照这一

观念, 在具体计算两个置换乘积 SR 时, 先把 S 的各列排列次序进行交换, 使 S 的第一行的排列次序和 R 的第二行次序一样, 然后用 S 的第二行代替 R 的第二行, 就得到乘积置换 SR. 也可以等价地, 先把 R 的各列排列次序进行交换, 使 R 的第二行的排列次序和 S 的第一行次序一样, 然后用 R 的第一行代替 S 的第一行, 就得到乘积置换 SR. 两种方法的计算结果是完全相同的. 例如

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 1 & 2 & 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 4 & 5 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 5 & 1 & 3 \end{pmatrix},$$

$$SR = \begin{pmatrix} 3 & 4 & 5 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 5 & 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 4 & 5 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 4 & 5 & 1 & 3 \end{pmatrix} \tag{6.3}$$

或

$$SR = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 1 & 2 & 4 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 4 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 4 & 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 & 4 & 5 \end{pmatrix} \tag{6.4}$$

我们看到, 式 (6.3) 和 (6.4) 给出的结果, 每一列上下的数字关系都是相同的. 例如, 第 4 位置的客体经变换 R 排到了第 2 位置, 再经过 S 变换, 从第 2 位置变到第 1 位置, 而式 (6.3) 和 (6.4) 给出的结果中, 数字 4 下方填的数字都是 1.

置换变换虽用矩阵来描写, 但置换的乘积并不服从通常的矩阵乘积规则. 作为变换的乘积, 两个置换的乘积仍是一个置换, 置换乘积满足结合律, 但不满足交换律. 所有客体位置不变的置换是恒等变换 E, 它的上下两行数字完全相同

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ 1 & 2 & 3 & \cdots & n \end{pmatrix} \tag{6.5}$$

E 与任何置换 R 相乘仍得 R, 起恒元的作用. 把置换上下两行交换得逆置换, 例如

$$R^{-1} = \begin{pmatrix} r_1 & r_2 & \cdots & r_n \\ 1 & 2 & \cdots & n \end{pmatrix} \tag{6.6}$$

$$R^{-1}R = \begin{pmatrix} r_1 & r_2 & \cdots & r_n \\ 1 & 2 & \cdots & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ r_1 & r_2 & \cdots & r_n \end{pmatrix} = E$$

n 个客体共有 $n!$ 个不同的置换. 按照上述置换乘积规则, n 个客体的所有置换的集合满足群的四个条件, 构成群, 称为 n 个客体置换群, 记作 S_n. S_n 群的阶数为 $g = n!$. 在 n 个客体中任选 m 个客体, 这 m 个客体的所有置换变换构成置换群 S_m, 它是 S_n 群的子群.

在文献中对置换及其乘积有不同的定义. 例如, 有的书把式 (6.1) 给出的置换 R 定义为, 第 j 位置的客体 “变成” 第 r_j 位置的客体, 即原来排在第 r_j 位置的客

体, 经过置换 R 后排到了第 j 位置, 这种定义正好与我们的定义差一个逆变换. 读者在看一本书时要注意书中采用的定义.

二、轮换

轮换是一类特殊的置换. 如果在一个置换中, 有 $n-\ell$ 个客体保持不变, 而余下的 ℓ 个客体顺序变换, 即第 a_1 位置的客体排到第 a_2 位置, 第 a_2 位置的客体排到第 a_3 位置, 以此类推, 最后第 a_ℓ 位置的客体排到第 a_1 位置, 形成一个循环, 则这样的置换称为轮换, ℓ 称为轮换长度. 轮换常用一行矩阵来描写

$$(a_1\ a_2\ \cdots\ a_\ell) = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_{\ell-1} & a_\ell & b_1 & \cdots & b_{n-\ell} \\ a_2 & a_3 & \cdots & a_\ell & a_1 & b_1 & \cdots & b_{n-\ell} \end{pmatrix} \tag{6.7}$$

在用行矩阵描写轮换时, 数字的排列次序不能改变, 但允许数字顺序变换

$$(q\ a\ b\ c\ \cdots\ p) = (a\ b\ c\ \cdots\ p\ q) = (b\ c\ \cdots\ p\ q\ a) \tag{6.8}$$

例如

$$\begin{aligned} &(1\ 2\ 3) = (2\ 3\ 1) = (3\ 1\ 2) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \\ &\neq (2\ 1\ 3) = (1\ 3\ 2) = (3\ 2\ 1) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} = (1\ 2\ 3)^{-1} \end{aligned} \tag{6.9}$$

长度为 1 的轮换是恒等变换, 长度为 2 的轮换称为对换. 显然对换满足

$$(a\ b) = (b\ a)\ , \qquad (a\ b)\,(a\ b) = E \tag{6.10}$$

推而广之, 长度为 ℓ 的轮换, 它的 ℓ 次自乘等于恒元 (见习题第 2 题), 即它的阶数为 ℓ.

两个没有公共客体的轮换, 乘积次序可以交换. 对任一给定的置换 R, 任选一数 a_1, 设经过置换 R, 第 a_1 位置的客体变到第 a_2 位置, 第 a_2 位置的客体变到第 a_3 位置, 以此类推, 在此客体链中总会有某客体, 例如第 a_ℓ 位置的客体变到第 a_1 位置, 形成一个循环, 则置换 R 包含一个长度为 ℓ 的轮换. 然后, 再在余下的数中任选一数 b_1, 如上法找出它的客体链, 确定 R 中包含的另一个轮换. 两轮换没有公共客体, 因而乘积次序可以交换. 把这做法继续下去, 总能穷尽全部 n 个数, 从而把置换 R 分解为若干个没有公共客体的轮换乘积. 这些轮换的乘积次序可以互相交换. 在这意义上说, 任何置换都可以唯一地分解为没有公共客体的轮换乘积. 在分解中出现的长度为 1 的轮换 (恒元) 可以略去. 例如, 式 (6.3) 用到的两个置换 R 和 S 可分别分解为

$$\begin{aligned} R &= (1\ 3\ 5)\,(2\ 4) = (2\ 4)\,(1\ 3\ 5)\ , \\ S &= (1\ 3\ 2)\,(4)\,(5) = (1\ 3\ 2) \end{aligned}$$

把一置换分解为没有公共客体的轮换乘积时, 各轮换长度 ℓ_i 的集合, 称为该置换的轮换结构. 例如, 前例中, R 的轮换结构是 $(3\ 2)$, S 的轮换结构是 $(3,1,1) \equiv (3,1^2)$. 在表达一个置换的轮换结构时, 轮换长度 ℓ_i 的排列次序可以任意. 相同的轮换长度可用幂次方式给出. 一般说来, n 个客体的任一置换 R 的轮换结构可表为

$$(\ell_1, \ell_2, \cdots) \ , \qquad \sum_i \ell_i = n \tag{6.11}$$

把一个正整数 n 分解为若干个正整数 ℓ_i 之和, 这样的正整数的集合称为 n 的一组配分数 (partition). 置换的轮换结构是由一组配分数来描写的.

既然每一置换都可分解为没有公共客体的轮换乘积, 当把两个置换相乘时, 我们需要计算两个有公共客体的轮换乘积问题. 通常认为, 只有把置换乘积化为没有公共客体的轮换乘积时, 才算把乘积化到了最简形式.

先讨论只有一个公共客体的轮换乘积的计算方法. 例如

$$\begin{aligned}(a\,b\,c\,d)\,(d\,e\,f) &= \begin{pmatrix} a & b & c & e & f & d \\ b & c & d & e & f & a \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & b & c & d & e & f \\ a & b & c & e & f & d \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a & b & c & d & e & f \\ b & c & d & e & f & a \end{pmatrix} = (a\,b\,c\,d\,e\,f)\end{aligned}$$

推而广之

$$(a\,b\ \cdots\ c\,d)\,(d\,e\ \cdots\ f) = (a\,b\ \cdots\ c\,d\,e\ \cdots\ f) \tag{6.12}$$

这公式可以做如下两种理解. 从左面向右面看, 式 (6.12) 提供有一个公共客体的两轮换的乘积规则: 先按式 (6.8), 在每个轮换内部, 把公共客体顺序变到最右面或最左面的位置, 然后按式 (6.12) 把两个轮换 “接” 起来. 从右面向左面看, 式 (6.12) 提供把一个轮换分解为有一个公共客体的两轮换乘积的规则: 在轮换中任一客体的位置, 例如 d 处, 把轮换 “切断” 成两个轮换的乘积, 并让 d 同时出现在两个轮换中.

按照这样的理解, 很容易利用式 (6.12) 计算有任意多个公共客体的轮换乘积问题. 其基本思想就是先把轮换切断, 使每一对轮换乘积都只包含一个公共客体, 从而可用式 (6.12) 接起来. 例如, 有两个公共客体的轮换乘积可用下法计算

$$\begin{aligned}&(a_1\ \cdots a_i\ c\ a_{i+1}\ \cdots\ a_j\ d)\,(d\ b_1\ \cdots b_r\ c\ b_{r+1}\ \cdots\ b_s) \\ &\quad = (a_1\ \cdots a_i\ c)\,(c\ a_{i+1}\ \cdots\ a_j\ d)\,(d\ b_1\ \cdots b_r\ c)\,(c\ b_{r+1}\ \cdots\ b_s) \\ &\quad = (a_1\ \cdots a_i\ c)\,(a_{i+1}\ \cdots\ a_j\ d\ c)\,(c\ d\ b_1\ \cdots b_r)\,(c\ b_{r+1}\ \cdots\ b_s) \\ &\quad = (a_1\ \cdots a_i\ c)\,(a_{i+1}\ \cdots\ a_j\ d)\,(d\ c)\,(c\ d)\,(d\ b_1\ \cdots b_r)\,(c\ b_{r+1}\ \cdots\ b_s) \\ &\quad = (a_1\ \cdots a_i\ c)\,(a_{i+1}\ \cdots\ a_j\ d)\,(d\ b_1\ \cdots b_r)\,(c\ b_{r+1}\ \cdots\ b_s) \\ &\quad = (a_1\ \cdots a_i\ c\ b_{r+1}\ \cdots\ b_s)\,(a_{i+1}\ \cdots\ a_j\ d\ b_1\ \cdots b_r)\end{aligned}$$

三、置换群的类

从另一角度来理解两置换乘积的公式 (6.3) 和 (6.4). 式 (6.3) 告诉我们, 当把 S 从左面乘到 R 上, 其结果是把 R 置换的第二行数字做 S 置换. 而式 (6.4) 告诉我们, 当把 R 从右面乘到 S 上, 其结果是把 S 置换的第一行数字做 R^{-1} 置换. 结合起来, 把描写 R 置换的两行数字同时做 S 置换, 就得到 R 的共轭元素 SRS^{-1}. 特别当 R 是一个轮换时

$$S\,(a\ b\ c\ \cdots\ d)\,S^{-1} = (s_a\ s_b\ s_c\ \cdots\ s_d) \tag{6.13}$$

共轭变换不改变轮换的长度, 只改变轮换涉及的客体编号. 因此, 置换群中有相同轮换结构的元素互相共轭, 它们的集合构成置换群的类. 置换群的类是由置换的轮换结构 (6.11) 来描写的.

式 (6.13) 还可作另一种理解. 把式 (6.13) 的 S^{-1} 移到等式右面

$$S\,(a\ b\ c\ \cdots\ d) = (s_a\ s_b\ s_c\ \cdots\ s_d)\,S \tag{6.14}$$

此式说明, 当 S 从轮换左面移到轮换右面时, 轮换中的客体做 S 置换; 反之, 当 S 从轮换右面移到轮换左面时, 轮换中的客体做 S^{-1} 置换. 把轮换换成任意置换, 这结论也成立.

置换群 S_n 的类数等于整数 n 分解为不同配分数 [见式 (6.11)] 的数目. 这数目的解析表达式很难写出 (例如参考书 [1] 第一章). 但从另一方面说, 这不同配分数的数目又很重要, 它与置换群 S_n 的类数 $g_c(n)$ 直接相关. 下面列出若干置换群 S_n 的类数 $g_c(n)$ 值. 对不太大的 n 值, 写出所有不同的配分数的方法, 将在讲到杨图时再介绍.

$$\begin{array}{llll} g_c(1)=1, & g_c(2)=2, & g_c(3)=3, & g_c(4)=5 \\ g_c(5)=7, & g_c(6)=11, & g_c(7)=15, & g_c(8)=22 \\ g_c(9)=30, & g_c(10)=42, & g_c(20)=627, & g_c(50)=204226 \\ g_c(100)=190569292, & & g_c(200)=3972999029388 & \end{array} \tag{6.15}$$

四、交变子群

在轮换每一客体处都切断, 则长度为 ℓ 的轮换分解为 $\ell-1$ 个对换的乘积

$$(a\ b\ c\ \cdots\ p\ q) = (a\ b)\,(b\ c)\cdots(p\ q)$$

当然, 这些对换有公共客体, 而且这种分解不是唯一的. 例如

$$E = (a\ b)\,(a\ b)\,(b\ c)\,(b\ c) = (a\ b)\,(a\ c)\,(a\ b)\,(b\ c)$$

同理, 任何置换都可以分解为若干个对换的乘积. 这种分解虽然不是唯一的, 但容易证明, 它包含对换个数的偶奇性与分解方式无关. 为了证明这一命题, 借用范德蒙德 (Vandermonde) 行列式的概念

$$D(x_1, x_2, \cdots, x_n) = \begin{vmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ x_1^2 & x_2^2 & \cdots & x_n^2 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x_1^{n-1} & x_2^{n-1} & \cdots & x_n^{n-1} \end{vmatrix} = \prod_{i>j} (x_i - x_j)$$

把 x_j 做任何对换, 行列式改变符号. 但把 n 个 x_j 做置换 R, 行列式是否改变符号, 完全由 R 本身决定, 与 R 的分解方式无关. 另一方面, 对 R 的每一种分解, 包含对换的偶奇性又确实决定了行列式是否改号. 因此在给定 R 的分解中包含对换个数的偶奇性是完全确定的.

当把置换分解为对换乘积时, 对换数目是偶数的置换称为偶置换, 对换数目是奇数的置换称为奇置换. 长度为奇数的轮换是偶置换, 长度为偶数的轮换是奇置换. 两个偶置换的乘积或两个奇置换的乘积是偶置换, 一个偶置换和一个奇置换的乘积是奇置换. 恒元是偶置换. 置换群中所有偶置换的集合构成置换群的一个指数为 2 的不变子群, 称为交变 (alternating) 子群. 奇置换的集合是它的陪集, 商群是二阶群. 因此, 当 $n > 1$ 时, 置换群 S_n 都有一个反对称表示, 在此表示中, 偶置换对应 1, 奇置换对应 -1. 一个置换 R 在反对称表示中的数值称为它的置换宇称, 记作 $\delta(R)$

$$\delta(R) = \begin{cases} 1\,, & \text{当}R\text{是偶置换} \\ -1\,, & \text{当}R\text{是奇置换} \end{cases} \tag{6.16}$$

五、置换群的生成元

相邻客体的对换 $P_a = (a \ \ a+1)$ 在置换群中起着重要作用. 任何置换都可表为对换的乘积, 而任何对换又都可表为相邻客体的对换乘积

$$\begin{aligned} (a \ \ d) &= (d \ \ a) = P_{a-1}P_{a-2}\cdots P_{d+1}P_dP_{d+1}\cdots P_{a-2}P_{a-1} \\ &= P_dP_{d+1}\cdots P_{a-2}P_{a-1}P_{a-2}\cdots P_{d+1}P_d\,, \qquad d < a \end{aligned} \tag{6.17}$$

P_a 满足

$$\begin{aligned} & P_a^2 = E\,, \\ & P_aP_b = P_bP_a\,, \qquad \text{当} \ \ |a-b| \geqslant 2\,, \\ & P_aP_{a+1}P_a = (a \ \ a+2) = P_{a+1}P_aP_{a+1} \end{aligned} \tag{6.18}$$

引入长度为 n 的轮换 W

$$W = (1\ 2\ \cdots\ n)\,, \qquad W^{-1} = W^{n-1} \tag{6.19}$$

则

$$P_a = WP_{a-1}W^{-1} = W^{a-1}P_1W^{-a+1} \tag{6.20}$$

因此, W 和 P_1 是置换群的生成元, 置换群的秩为 2.

6.2 群代数的理想和幂等元

为了用杨算符方法研究置换群的不等价不可约表示, 我们暂时离开置换群的讨论, 介绍有限群的理想和幂等元的概念. 实际上, 杨算符正是置换群的原始幂等元.

一、群代数和正则表示

首先复习有限群群代数的概念. 对阶数为 g 的有限群 G, 以群元素为基构成的 g 维线性空间 $\mathcal{L}$, 称为群空间, 这组基称为自然基. 群空间的矢量是群元素的线性组合. 两矢量的乘积, 系数部分做普通的复数乘积, 群元素部分按照群元素的乘积规则相乘, 则 $\mathcal{L}$ 对于此乘积是封闭的, 构成群代数. 在群代数中, 群元素也可看作线性算符, 它左乘或右乘到群代数的矢量上, 使矢量按给定的规则发生变化. 群代数是群元素算符的不变空间, 对应群 G 的正则表示.

正则表示是可约的, 它包含群 G 各不等价不可约表示的重数等于该表示的维数. 这就是说, 对于左乘群元素的运算, 群代数中存在许多不变子代数, 这样的子代数称为群代数的左理想 (left ideal). 子代数 $\mathcal{L}_1 \subset \mathcal{L}$ 构成左理想的条件是对任何 $t \in \mathcal{L}$ 和 $x \in \mathcal{L}_1$, 有 $tx \in \mathcal{L}_1$. 群代数可以分解为若干个左理想的直和, 每个左理想对应群 G 的一个表示. 对于右乘群元素的运算, 同样可以定义群代数的右理想.

二、左理想和幂等元

先从简单例子的讨论开始. 设 $\mathcal{L}$ 分解为两个左理想 $\mathcal{L}_1$ 和 $\mathcal{L}_2$ 的直和

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 \oplus \mathcal{L}_2$$

则群代数中任一矢量 t 都可唯一地分解为分属两个左理想的矢量之和

$$t = t_1 + t_2\ , \qquad t \in \mathcal{L}\ , \qquad t_1 \in \mathcal{L}_1\ , \qquad t_2 \in \mathcal{L}_2 \tag{6.21}$$

恒元也可做此分解

$$E = e_1 + e_2\ , \qquad e_j \in \mathcal{L}_j \tag{6.22}$$

而

$$t = tE = te_1 + te_2$$

因为左理想对左乘群元素保持不变

$$te_1 \in \mathcal{L}_1\ , \qquad te_2 \in \mathcal{L}_2$$

所以

$$t_1 = te_1 \ , \qquad t_2 = te_2 \tag{6.23}$$

其中, t 是群代数中的任意矢量. 进一步

$$\text{若}\ \ t \in \mathcal{L}_1\ ,\ \ \text{则}\ \ te_1 = t_1 = t\ ,\quad te_2 = 0 \tag{6.24}$$

由此得

$$e_1^2 = e_1\ , \qquad e_2^2 = e_2\ , \qquad e_1e_2 = e_2e_1 = 0 \tag{6.25}$$

式 (6.23)~(6.25) 告诉我们, e_j 是一个投影算符, 它把左乘在它上面的矢量 t 投影到左理想 $\mathcal{L}_j$ 中. 反过来说, 把群代数所有矢量都左乘到 e_j 上, 就得到左理想 $\mathcal{L}_j$

$$\mathcal{L}e_j = \mathcal{L}_j \tag{6.26}$$

这样的投影算符 e_j 称为幂等元 (idempotent), 这样的左理想 $\mathcal{L}_j$ 称为幂等元 e_j 生成的左理想.

群代数中满足下式的 n 个矢量 e_j 称为正交幂等元

$$e_ie_j = \delta_{ij}e_j\ , \qquad i,\ j = 1,\ 2,\ \cdots,\ n \tag{6.27}$$

把群代数 $\mathcal{L}$ 中的任意矢量 t 左乘到确定的幂等元 e_j 上, 得到的所有矢量 te_j 的集合, 构成由幂等元 e_j 生成的左理想, $\mathcal{L}_j = \mathcal{L}e_j$. 由于式 (6.24), n 个左理想 $\mathcal{L}_j$ 互相都没有公共矢量, 因而它们之和就是它们的直和.

对一个幂等元 e_1 来说, $e_1^2 = e_1$, 所有 te_1 的集合是左理想 $\mathcal{L}_1$, 而满足 $re_1 = 0$ 的所有 r 的集合也构成左理想 $\mathcal{L}_1'$, 这两个左理想没有公共矢量, 而且是互补的

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 \oplus \mathcal{L}_1' \tag{6.28}$$

实际上, $\mathcal{L}_1'$ 是幂等元 $(E - e_1)$ 生成的左理想. 对群代数中的一般矢量 z 来说, 虽然所有 tz 的集合构成左理想 $\mathcal{L}_z$, 满足 $rz = 0$ 的所有 r 的集合也构成左理想 $\mathcal{L}_z'$, 但这两个左理想可能有公共矢量, 而且它们之和也不一定充满整个群代数 $\mathcal{L}$. 举一个极端的例子. 设 P_a 是相邻客体的对换, 则

$$z = (E + P_1)\,P_2\,(E - P_1) \neq 0\ , \qquad z^2 = 0 \tag{6.29}$$

因此 $\mathcal{L}_z \subset \mathcal{L}_z'$, 而且 $\mathcal{L}$ 中存在不属于 $\mathcal{L}_z'$ 的矢量, 例如恒元.

三、原始幂等元

对于给定的幂等元 e_j, 由式 (6.26) 生成左理想 $\mathcal{L}_j$, 在左理想中任找一组线性无关的矢量 x_μ 为基, 它的个数等于左理想的维数 d. 用群元素 R 左乘到基上, 仍是此左理想中的一个矢量, 可表为这组基的线性组合

$$Rx_\mu = \sum_{\nu=1}^{d} x_\nu D_{\nu\mu}(R) \tag{6.30}$$

$D(R)$ 是左乘元素 R 在这组基中的矩阵形式, 它的集合构成群 G 的一个线性表示, 称为左理想 $\mathcal{L}_j$ 对应的表示. 如果两个左理想对应的表示等价, 则称这两个左理想等价, 也称这两个幂等元等价.

在两个等价的左理想中, 适当选择基, 可得到相同的表示. 将这样两组基及其线性组合一一对应起来, 则这种对应关系对左乘群元素保持不变. 反之, 如果两个左理想的矢量间存在对左乘群元素保持不变的一一对应关系, 则此两左理想对应的表示相同, 两左理想等价.

如果左理想 $\mathcal{L}_j$ 对应可约表示, 则此左理想还可用上一小节方法, 进一步分解为更小的左理想之和, 现在幂等元 e_j 代替式 (6.22) 中的恒元, 分解为若干幂等元之和

$$\begin{aligned}
&e_j = e_a + e_b \ , \\
&e_a^2 = e_a \ , \qquad e_b^2 = e_b \ , \qquad e_a e_b = e_b e_a = 0 \ , \\
&e_a e_j = e_a \ , \qquad e_b e_j = e_b
\end{aligned} \tag{6.31}$$

这种分解继续进行下去, 最后可使左理想对应不可约表示. 对应不可约表示的左理想称为最小 (minimal) 左理想, 相应的幂等元称为原始 (primitive) 幂等元.

我们引进左理想和幂等元的目的, 是要研究有限群的不等价不可约表示. 因此, 我们需要有一个方法来判别幂等元是不是原始的, 两个原始幂等元是不是等价的, 以及幂等元作为投影算符的完备性问题. 下面两个定理就是要解决这些问题.

定理一 设 e_1 和 e_2 是生成两个最小左理想 $\mathcal{L}_1$ 和 $\mathcal{L}_2$ 的原始幂等元, 则此两最小左理想等价的充要条件是, 至少存在一个群元素 S, 满足

$$e_1 S e_2 \neq 0 \tag{6.32}$$

证明 充分性. 若式 (6.32) 成立, 它就提供由左理想 $\mathcal{L}_1$ 到左理想 $\mathcal{L}_2$ 的一个映射, 即由左理想 $\mathcal{L}_1$ 的矢量到左理想 $\mathcal{L}_2$ 的矢量间的一个对应关系

$$x_1 \in \mathcal{L}_1 \quad \longrightarrow \quad x_2 = x_1 e_1 S e_2 \in \mathcal{L}_2 \tag{6.33}$$

这对应关系显然对左乘群元素保持不变, 因为

$$Rx_1 \in \mathcal{L}_1 \quad \longrightarrow \quad Rx_2 = Rx_1 e_1 S e_2 \in \mathcal{L}_2 \tag{6.34}$$

只要证明两左理想的矢量间的这种对应关系是一一对应关系 (双射, bijective), 则此两左理想等价. 证明中主要用到两左理想都是最小左理想.

先证满射 (surjective), 就是由 x_1 映射过来的 x_2 充满 $\mathcal{L}_2$. 设所有这样的 x_2 集合构成 $\mathcal{L}_2$ 的一个子空间 $\mathcal{L}_3$, 式 (6.34) 指出, 它对左乘群元素保持不变, 它是左理想. 因为 $x_1 = e_1 \in \mathcal{L}_1$ 时, $x_2 = e_1 S e_2 \neq 0$, 所以它不是零空间, 由 $\mathcal{L}_2$ 是最小左理想知, $\mathcal{L}_3 = \mathcal{L}_2$.

其次证只要 $x_1 \neq 0$, 必有 $x_2 \neq 0$. 否则所有对应 $x_2 = 0$ 的那些 x_1 的集合构成 $\mathcal{L}_1$ 的一个子空间 $\mathcal{L}_4$. $\mathcal{L}_4$ 对左乘群元素保持不变, 是 $\mathcal{L}_1$ 的一个左理想. 又因它没有包含 e_1, 它未充满 $\mathcal{L}_1$, 所以只能是零空间.

最后证单射 (injective), 就是不同的 x_1 映射过来的 x_2 必不相同. 若 $\mathcal{L}_1$ 中的 x_1 和 x_1' 都映射到 $\mathcal{L}_2$ 中同一个 x_2, 则 $x_1 - x_1'$ 映射到零矢量, 矛盾. 充分性证完.

必要性. 设两左理想等价, $\mathcal{L}_1$ 中的幂等元 e_1 对应 $\mathcal{L}_2$ 中矢量 $b = be_2 \neq 0$, 则 $e_1 e_1 = e_1$ 在 $\mathcal{L}_2$ 中对应矢量 $e_1 b = e_1 b e_2 = b \neq 0$. 因此至少有一个群元素 S 满足式 (6.32). 证完.

推论　e_j 是原始幂等元的充要条件是对 $\mathcal{L}$ 中任一矢量 t 都有下式成立

$$e_j^2 = e_j \ , \qquad e_j t e_j = \lambda_t e_j \tag{6.35}$$

其中, λ_t 是依赖于 t 的常数, 可以为零.

证明　用反证法证充分性. 设式 (6.35) 成立, 而 e_j 不是原始的, 它能分解为两幂等元之和, 即式 (6.31) 成立, 则

$$\begin{aligned} e_a &= e_j e_a e_j = \lambda_a e_j \ , \\ e_a &= e_a^2 = e_a \left(\lambda_a e_j\right) = \lambda_a e_a \end{aligned}$$

故 $e_a = 0$ 或 $\lambda_a = 1$, 即 $e_j = e_b$ 或 $e_j = e_a$, e_j 不能再分解.

再证必要性. 已知 e_j 是原始幂等元, 则 $e_j^2 = e_j$ 成立. 若 $e_j t e_j = 0$, 则式 (6.35) 已经成立. 若 $e_j t e_j \neq 0$, 则它提供 e_j 生成的左理想 $\mathcal{L}_j$ 的一个自映射. 映射前后两组基 x_μ 和 $x_\mu' = x_\mu e_j t e_j$, 在左乘群元素中得到的表示是相同的. 设 $x_\mu' = \sum_\nu x_\nu M_{\nu\mu}$, 则 $M^{-1} D(R) M = D(R)$, 由舒尔定理, M 是常数矩阵, $x_\mu' = \lambda_t x_\mu$. 证完.

式 (6.35) 可放宽成

$$e_j t e_j = \lambda_t e_j \ , \qquad e_j e_j = \lambda_E e_j \neq 0 \tag{6.36}$$

因为 $e_j' = e_j / \lambda_E$ 满足式 (6.35). 将来我们要证明杨算符满足条件式 (6.36), 因而正比于置换群的原始幂等元, 并由此建立置换群的不可约表示, 然后用式 (6.32) 来判别其等价性.

定理二 由满足式 (6.27) 的 n 个正交的幂等元 e_j 生成的 n 个左理想 $\mathcal{L}_j$ 之直和, 等于群代数 $\mathcal{L}$ 的充要条件是

$$E = \sum_{j=1}^{n} e_j \ . \tag{6.37}$$

证明 充分性. 若式 (6.37) 成立, $\mathcal{L}$ 中任一矢量 t 都可用下法唯一地分解为分属各 $\mathcal{L}_j$ 的矢量之和

$$t = tE = \sum_{j=1}^{n} te_j \ , \qquad te_j \in \mathcal{L}_j$$

因而 $\mathcal{L}$ 是 $\mathcal{L}_j$ 的直和.

必要性. 因为 $\mathcal{L}$ 是 $\mathcal{L}_j$ 的直和, 所以恒元 E 可唯一地分解为分属各 $\mathcal{L}_j$ 的矢量之和, 属 $\mathcal{L}_j$ 的矢量为 $Ee_j = e_j$. 证完.

四、右理想和双边理想

群代数不仅对左乘群元素保持不变, 对右乘群元素也保持不变. 如果 $\mathcal{L}$ 的子代数 $\mathcal{R}_j$ 对右乘群元素保持不变, 则称右理想. 前面关于左理想的定义, 定理和各种性质, 都很容易推广并适合于右理想. 应该注意的是, 由左理想的基计算表示的公式 (6.30), 对右理想必须做适当的修改, 否则正如 3.1 节所讨论的, 会变成内禀群的表示. 设 $\mathcal{R}_j = e_j\mathcal{L}$ 是幂等元 e_j 生成的右理想, 取 $\mathcal{R}_j$ 的一组基 x_μ, 在群元素 R 的右乘作用下, 按式 (3.10) 得

$$x_\mu R = \sum_{\nu} D_{\mu\nu}(R) x_\nu \tag{6.38}$$

正因为式 (6.38) 改为按 $D(R)$ 的列指标求和, 才使由式 (6.38) 建立起来的群元素 R 和矩阵 $D(R)$ 间的一一或多一对应关系, 它们的乘积仍按同一规则对应, 从而 $D(R)$ 的集合构成群 G 的线性表示.

一般说来, 由同一个幂等元 e_j 生成的左理想 $\mathcal{L}_j$ 和右理想 $\mathcal{R}_j$ 不一定相同. 如果它们相同

$$\mathcal{L}e_j = \mathcal{L}_j \ , \qquad e_j\mathcal{L} = \mathcal{R}_j \ , \qquad \mathcal{L}_j = \mathcal{R}_j = \mathcal{I}_j \tag{6.39}$$

则 $\mathcal{I}_j$ 称为由幂等元 e_j 生成的双边理想 (two-side ideal)

$$te_j \in \mathcal{I}_j \ , \qquad e_j t \in \mathcal{I}_j \tag{6.40}$$

如果双边理想不能再分解为更小的子双边理想的直和, 则此双边理想称为单纯 (simple) 的双边理想.

五、标准基和不可约表示

把群代数 $\mathcal{L}$ 分解为一系列最小左理想 $\mathcal{L}_\mu^{(j)}$ 的直和, 其中等价的左理想标以相同的上标 (j). 把等价的左理想 $\mathcal{L}_\mu^{(j)}$ 先直和起来, 记作 $\mathcal{L}^{(j)}$, 然后再直和成群代数. 恒元也做相应的分解

$$\begin{aligned}&\mathcal{L} = \bigoplus_j \mathcal{L}^{(j)} = \bigoplus_{j\mu} \mathcal{L}_\mu^{(j)} , \qquad \mathcal{L}^{(j)} = \bigoplus_\mu \mathcal{L}_\mu^{(j)} , \\ &E = \sum_j e^{(j)} = \sum_{j\mu} e_\mu^{(j)} , \qquad e^{(j)} = \sum_\mu e_\mu^{(j)}\end{aligned} \tag{6.41}$$

其中

$$\begin{aligned}&\mathcal{L}^{(j)} = \mathcal{L}e^{(j)} , \qquad \mathcal{L}_\mu^{(j)} = \mathcal{L}e_\mu^{(j)} , \\ &e_\mu^{(j)} e_\nu^{(i)} = \delta_{ji}\delta_{\mu\nu} e_\mu^{(j)} , \qquad e_\mu^{(j)} t e_\nu^{(i)} = \delta_{ji} e_\mu^{(j)} t e_\nu^{(j)} , \qquad t \in \mathcal{L}\end{aligned} \tag{6.42}$$

现在我们来证明, 满足 (6.41) 和 (6.42) 式的 $\mathcal{L}^{(j)}$ 是单纯的双边理想.

定理三　设 $D^j(G)$ 是有限群 G 的 d_j 维不可约表示, $e_\mu^{(j)}$ 是群 G 的群代数 $\mathcal{L}$ 中 d_j 个互相等价的正交原始幂等元, 由它们生成的最小左理想 $\mathcal{L}_\mu^{(j)} = \mathcal{L}e_\mu^{(j)}$ 都对应表示 $D^j(G)$, 则 d_j 个最小左理想 $\mathcal{L}_\mu^{(j)}$ 的直和 $\mathcal{L}^{(j)}$ 是群代数 $\mathcal{L}$ 中的单纯双边理想, 而且由 $e_\mu^{(j)}$ 生成的 d_j 个最小右理想 $\mathcal{R}_\mu^{(j)} = \mathcal{L}e_\mu^{(j)}$ 的直和也是 $\mathcal{L}^{(j)}$

$$\mathcal{L}^{(j)} = \mathcal{L}e^{(j)} = e^{(j)}\mathcal{L} = \bigoplus_\mu \mathcal{L}_\mu^{(j)} = \bigoplus_\mu \mathcal{R}_\mu^{(j)} \tag{6.43}$$

证明　首先, 证明 $\mathcal{L}^{(j)}$ 也是右理想. 设 t 是 $\mathcal{L}$ 中任一矢量, 则

$$e^{(j)}t = e^{(j)}tE = \sum_{\mu i\nu} e_\mu^{(j)} t e_\nu^{(i)} = \sum_\nu \left(\sum_\mu e_\mu^{(j)} t \right) e_\nu^{(j)} \in \mathcal{L}^{(j)} \tag{6.44}$$

同样可证 d_j 个最小右理想 $\mathcal{R}_\mu^{(j)}$ 的直和也是左理想, 因而等于 $\mathcal{L}^{(j)}$.

其次, 用反证法证明双边理想 $\mathcal{L}^{(j)}$ 是单纯的. 因为 $\mathcal{L}^{(j)}$ 中包含的所有最小左理想都对应同一个不可约表示, 所以若 $\mathcal{I}$ 是 $\mathcal{L}^{(j)}$ 的子双边理想, 则它包含的最小左理想都对应此不可约表示. 取 $\mathcal{I}$ 的一个最小左理想, 幂等元为 e, 则由定理一, 对每一个 μ 至少存在一个群元素 R_μ, 使 $eR_\mu e_\mu^{(j)} \neq 0$. 它既属于双边理想 $\mathcal{I}$, 又属于最小左理想 $\mathcal{L}_\mu^{(j)}$. 既然 $\mathcal{I}$ 至少包含 $\mathcal{L}^{(j)}$ 中每一个最小左理想 $\mathcal{L}_\mu^{(j)}$ 中的一个矢量, 左乘群代数 $\mathcal{L}$ 后, $\mathcal{I}$ 就包含这些最小左理想全体, 即 $\mathcal{I} = \mathcal{L}^{(j)}$. 以后把 $\mathcal{L}^{(j)}$ 记作 $\mathcal{I}^{(j)}$. 证完.

推论一　群代数 $\mathcal{L}$ 中所有等价的最小左 (或右) 理想之和是单纯双边理想. 群代数关于单纯双边理想的分解是唯一的.

我们讨论幂等元的目的是寻找有限群 G 的所有不等价不可约表示. 现在我们来具体研究基的标准选择和不可约表示矩阵的计算方法. 这方法将直接帮助我们计算置换群的不等价不可约表示.

本小节后面部分只在单纯双边理想 $\mathcal{I}^{(j)}$ 内计算基和不可约表示，为了简化符号，略去所有上标 (j) 和下标 (j).

由定理一，一定存在群元素 R_ν，使下面定义的矢量 $b_{\nu 1}$ 不等于零

$$b_{\nu 1} = e_\nu R_\nu e_1 \neq 0 \ , \qquad b_{11} = e_1 \tag{6.45}$$

其中，已取 $R_1 = E$. 因为 d 个 $b_{\nu 1}$ 分属于不同的右理想 $\mathcal{R}_\nu$，所以它们线性无关. 这 d 个线性无关的矢量 $b_{\nu 1}$ 正好组成左理想 $\mathcal{L}_1$ 的一组基，左乘群元素 T 后可以得到 T 在此不可约表示中的表示矩阵 $D(T)$

$$T b_{\nu 1} = \sum_{\rho=1}^{d} b_{\rho 1} D_{\rho\nu}(T) \tag{6.46}$$

同理，存在 d 个元素 S_μ, $S_1 = E$，使

$$e_1 S_\mu e_\mu \equiv b'_{1\mu} \neq 0$$

用这组矢量 $b'_{1\mu}$ 把 $\mathcal{L}_1$ 的基 $b_{\nu 1}$ 映射到 $\mathcal{L}_\mu$ 中去，按照定理一的证明，映射得的矢量不为零

$$b'_{\nu\mu} = b_{\nu 1} b'_{1\mu} \neq 0$$

由定理一的推论

$$b'_{\mu\mu} = b_{\mu 1} b'_{1\mu} = e_\mu \left(R_\mu e_1 S_\mu \right) e_\mu = \lambda_\mu e_\mu \neq 0$$

令

$$b_{1\mu} = b'_{1\mu} / \lambda_\mu \ , \qquad b_{\nu\mu} = b_{\nu 1} b_{1\mu} \neq 0 \tag{6.47}$$

则

$$b_{\mu\mu} = b_{\mu 1} b_{1\mu} = e_\mu \tag{6.48}$$

又由定理一的推论，$b_{1\mu} b_{\mu 1} = \tau_\mu e_1$，且

$$b_{\mu 1} = b_{\mu\mu} b_{\mu 1} = b_{\mu 1} \left(b_{1\mu} b_{\mu 1} \right) = \tau_\mu b_{\mu 1}$$

因此

$$\tau_\mu = 1 \ , \qquad b_{1\mu} b_{\mu 1} = e_1 = b_{11} \tag{6.49}$$

$$b_{\nu\rho} b_{\lambda\mu} = \delta_{\rho\lambda} b_{\nu 1} b_{1\rho} b_{\rho 1} b_{1\mu} = \delta_{\rho\lambda} b_{\nu\mu} \tag{6.50}$$

满足式 (6.48) 和 (6.50) 的基 $b_{\nu\mu}$ 称为标准基. 当 μ 固定，d 个基 $b_{\nu\mu}$ 属于左理想 $\mathcal{L}_\mu$，当 ν 固定，d 个基 $b_{\nu\mu}$ 属于右理想 $\mathcal{R}_\nu$. 下面证明，在标准基中，每个左理想和右理想都对应相同的表示.

事实上, 在式 (6.46) 两边右乘 $b_{1\rho}$, 得

$$Tb_{\mu\rho} = \sum_{\nu=1}^{d} b_{\nu\rho} D_{\nu\mu}(T) \tag{6.51}$$

可见在标准基中, 所有左理想对应的表示相同. 再在式 (6.46) 两边左乘 $b_{1\rho}$, 得

$$b_{1\rho} T b_{\mu 1} = e_1 D_{\rho\mu}(T) \tag{6.52}$$

如果在右理想 $\mathcal{R}_\nu$ 中的表示是 $\overline{D}(T)$, 则由式 (6.38)

$$b_{\nu\rho} T = \sum_{\lambda=1}^{d} \overline{D}_{\rho\lambda}(T) b_{\nu\lambda} \tag{6.53}$$

左乘 $b_{1\nu}$ 和右乘 $b_{\mu 1}$, 得

$$b_{1\rho} T b_{\mu 1} = e_1 \overline{D}_{\rho\mu}(T)$$

可见 $D_{\rho\mu}(T) = \overline{D}_{\rho\mu}(T)$. 证完.

推论二　在群代数 $\mathcal{L}$ 的单纯双边理想 $\mathcal{I}^{(j)}$ 中包含的所有最小左理想 $\mathcal{L}_\mu^{(j)}$ 和最小右理想 $\mathcal{R}_\mu^{(j)}$ 都对应同一个不可约表示 $D^j(G)$.

推论三　由群代数 $\mathcal{L}$ 中的一个原始幂等元 e_j 生成的最小左理想 $\mathcal{L}e_j$ 和最小右理想 $e_j\mathcal{L}$ 都对应同一个不可约表示 $D^j(G)$.

6.3　杨图、杨表和杨算符

在这一节我们将给出杨算符的定义和讨论它的基本性质, 为下一节证明杨算符是置换群的原始幂等元打好基础.

一、杨图

有限群的不等价不可约表示个数等于类数. 置换群 S_n 的类由 n 的配分数描写, 因而置换群的不等价不可约表示也可用配分数来描写. 但是由相同配分数描写的类和不可约表示没有什么关系, 它们在符号上应该有所区别. 置换群的类用配分数 (ℓ) 描写, 而不可约表示对应的配分数记作 $[\lambda]$. 我们先用 $[\lambda]$ 来定义杨图, 以后再证明杨图对应置换群的不可约表示.

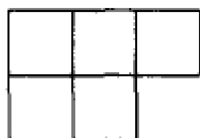
任取一组配分数 $[\lambda]$

$$[\lambda] = [\lambda_1,\ \lambda_2,\ \cdots,\ \lambda_m]\ , \qquad \lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_m > 0\ , \qquad \sum_{j=1}^{m} \lambda_j = n \tag{6.54}$$

画 n 格方格图, 分成 m 行, 左边对齐, 第一行含 λ_1 格, 第二行含 λ_2 格, 以此类推, 这样的方格图称为杨图 (Young pattern or diagram). 在杨图中, 上面行的格数不少于

下面行的格数, 左面列的格数不少于右面列的格数. 杨图的行数 m 不会大于总格数 n. 有时为了强调这一规则, 称它为正则杨图, 其实我们不讨论不满足此规则的杨图.

希望读者都能学会, 根据配分数 $[\lambda]$ 画出杨图, 根据杨图读出配分数, 对给定的 n, 列出全部不同杨图的方法. 前两条比较容易, 例如配分数为 $[3,2]$ 时, 杨图为



以后不再区分杨图和配分数, 常说杨图 $[\lambda]$. 对第三条, 最重要的是必须按一定次序来排列这些杨图或配分数, 切忌想到一个写一个, 这样很容易遗漏. 为此, 我们定义杨图的大小. 对两杨图 $[\lambda]$ 和 $[\lambda']$, 由第一行开始逐行比较它们的格数, 第一次出现格数不相同时, 格数大的杨图大于格数小的杨图. 对给定的 n, 自大而小排列杨图. 首先让 λ_1 由 n 开始自大而小排列, 然后, 在固定 λ_1 的条件下, 让 λ_2 自大而小排列, 但最大不超过 λ_1 和 $n-\lambda_1$, 再在固定 λ_1 和 λ_2 的条件下, 让 λ_3 自大而小排列, 但最大不超过 λ_2 和 $n-\lambda_1-\lambda_2$, 以此类推. 例如, $n=7$ 时有 15 组配分数, 它们作如下排列

$$\begin{array}{llll} [7], & [6,1], & [5,2], & [5,1,1] \\ [4,3], & [4,2,1], & [4,1,1,1], & [3,3,1] \\ [3,2,2], & [3,2,1,1], & [3,1,1,1,1], & [2,2,2,1] \\ [2,2,1,1,1], & [2,1,1,1,1,1], & [1,1,1,1,1,1,1] & \end{array} \tag{6.55}$$

二、杨表

对于给定的杨图 $[\lambda]$, 把由 1 到 n 这 n 个自然数分别填入杨图的 n 格中, 就得到一个杨表 (Young tableau). 有的书上把杨表译成杨盘. n 格的杨图有 $n!$ 个不同的杨表.

如果在杨表的每一行中, 左面的填数小于右面的填数, 在每一列中, 上面的填数小于下面的填数, 则此杨表称为正则 (standard) 杨表. 这种数字填充法称为正则填充法. 数学上可以证明, 对于给定的杨图 $[\lambda]$, 不同的正则杨表数为

$$d_{[\lambda]}(S_n) = \frac{n!}{r_1!r_2!\cdots r_m!}\prod_{j<k}^{m}(r_j - r_k) \tag{6.56}$$

其中, $r_j = \lambda_j + m - j$. 所有 n 格杨图的正则杨表数的平方和正好等于 $n!$

$$\sum_{[\lambda]}\left[d_{[\lambda]}(S_n)\right]^2 = n! \tag{6.57}$$

证明可参看参考书 [12] 第Ⅳ章 § 6.

在用式 (6.56) 计算正则杨表数 $d_{[\lambda]}$ 时, 分子分母会消掉不少因子, 例如对杨图 $[3,2,1,1]$

$$d_{[3,2,1,1]}(S_7) = \frac{7!}{6! \times 4! \times 2! \times 1!} 5 \times 4 \times 2 \times 3 \times 2 \times 1 = 35$$

有一个称为钩形 (hook) 规则的方法, 可以更方便地计算 $d_{[\lambda]}$. 对杨图的第 i 行第 j 列格子定义钩形数 h_{ij}, 它等于一条钩形路径在杨图中经过的格子数, 这条路径从杨图第 i 行最右面的格子处进入杨图, 向左走到第 i 行第 j 列格子处向下转弯, 然后在第 j 列最下面的格子处离开杨图. 一个格子的钩形数就等于该格所在行左面的格子数, 加上该格所在列下面的格子数, 再加 1. 把每格的钩形数 h_{ij} 填入杨图, 构成的杨表称为钩形数杨表, 记作 $Y_h^{[\lambda]}$. 例如, 杨图 $[3,2,1,1]$ 的钩形数杨表 $Y_h^{[\lambda]}$ 为

6	3	1
4	1	
2		
1		

而 $d_{[\lambda]}$ 等于 $n!$ 被所有钩形数 h_{ij} 除

$$d_{[\lambda]}(S_n) = \frac{n!}{Y_h^{[\lambda]}} = \frac{n!}{\prod_{ij} h_{ij}} \tag{6.58}$$

例如

$$d_{[3,2,1,1]}(S_7) = \frac{7!}{6 \times 4 \times 3 \times 2} = 35$$

式 (6.56) 和 (6.58) 是一致的, 因为容易验证, 第一行的钩形数乘积正好等于 $r_1!/\prod_{k>1}^{m}(r_1 - r_k)$, 以此类推.

下面对同一杨图, 定义两正则杨表的大小. 自第一行开始自左至右比较两杨表的填数, 如果都相同, 再比较第二行, 第三行等, 第一次发现填数不同时, 填数大的正则杨表大于填数小的正则杨表. 这种填数的比较, 相当把第二行填数补在第一行的右边, 把第三行的填数再补在右边, 依此类推, 构成一个含 n 个数字的 $(n+1)$ 进位数, 然后比较这数的大小, 因此文献中把这正则杨表的大小次序称为字典次序 (dictionary order). 按照正则杨表自小至大排列, 就能把给定杨图的所有正则杨表准确无误地全部列出来. 例如, 杨图 $[3,2]$ 的全部正则杨表自小至大排列如下

1	2	3
4	5	

,

1	2	4
3	5	

,

1	2	5
3	4	

,

1	3	4
2	5	

,

1	3	5
2	4	

.

用公式 (6.58) 计算也得 5

$$d_{[3,2]} = \frac{5!}{\begin{array}{|c|c|c|}\hline 4 & 3 & 1 \\ \hline 2 & 1 & \\ \cline{1-2}\end{array}} = 5$$

三、杨算符

对于给定的杨表, 同行数字间的置换称为该杨表的横向置换, 记作 P, 如果横向置换只牵涉到第 j 行数字, 则记作 P_j, 这样的第 j 行横向置换 P_j 共有 $\lambda_j!$ 个. 相似地, 对于给定的杨表, 同列数字间的置换称为该杨表的纵向置换, 记作 Q, 如果纵向置换只牵涉到第 k 列数字, 记作 Q_k, 若第 k 列有 τ_k 格, 则这样的第 k 列纵向置换 Q_k 共有 $\tau_k!$ 个.

对于给定的杨表, 所有横向置换之和称为该杨表的横算符, 记作 $\mathcal{P}$, 所有纵向置换乘其置换宇称后相加, 称为该杨表的纵算符, 记作 $\mathcal{Q}$, 该杨表的杨算符 $\mathcal{Y}$ 定义为 $\mathcal{P}$ 和 $\mathcal{Q}$ 的乘积

$$\begin{aligned} &P = \prod_j P_j\ , \qquad Q = \prod_k Q_k\ , \qquad \delta(Q)Q = \prod_k \delta(Q_k)Q_k, \\ &\mathcal{P} = \sum P = \sum \prod_j P_j = \prod_j \left(\sum P_j\right), \\ &\mathcal{Q} = \sum \delta(Q)Q = \sum \prod_k \delta(Q_k)Q_k = \prod_k \left[\sum \delta(Q_k)Q_k\right], \end{aligned} \tag{6.59}$$

$$\mathcal{Y} = \mathcal{P}\mathcal{Q} \tag{6.60}$$

正则杨表对应的杨算符称为正则杨算符.

因为只有在杨图给定, 杨表给定的条件下, 才能具体写出杨算符 $\mathcal{Y}$, 所以通常把对应这个杨算符 $\mathcal{Y}$ 的杨图和杨表, 就称为杨图 $\mathcal{Y}$ 和杨表 $\mathcal{Y}$. 如果单独说 $\mathcal{Y}$, 则指杨算符本身. 请注意不要混淆.

在具体写出给定杨表的横算符时, 通常先把每一行的所有横向置换加起来, 然后把不同行的横向置换之和乘起来. 同理, 在具体写出给定杨表的纵算符时, 先把每一列的所有纵向置换, 乘上各自的置换宇称后相加, 然后把不同列的纵向置换之代数和乘起来. 对于只有一格的行 (或列), 横 (纵) 向置换只有恒元, 在相乘时可以略去. 最后再把乘积的每一项都化成没有公共客体的轮换乘积. 注意, 不要忽略乘积的交叉项. 下面例子是根据杨表写出杨算符的标准方法. 设有杨表

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 & 5 & \\ \cline{1-2}\end{array}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{Y} \ &= \ \{E + (1\ 2) + (1\ 3) + (2\ 3) + (1\ 2\ 3) + (3\ 2\ 1)\} \\ &\quad \times \{E + (4\ 5)\}\{E - (1\ 4)\}\{E - (2\ 5)\} \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \{E+(1\ 2)+(1\ 3)+(2\ 3)+(1\ 2\ 3)+(3\ 2\ 1)\} \\
&\quad \times \{E+(4\ 5)\}\{E-(2\ 5)-(1\ 4)+(1\ 4)(2\ 5)\} \\
&= \{E+(1\ 2)+(1\ 3)+(2\ 3)+(1\ 2\ 3)+(3\ 2\ 1)\} \\
&\quad \times \{E-(2\ 5)-(1\ 4)+(1\ 4)(2\ 5)+(4\ 5)-(4\ 5\ 2)-(5\ 4\ 1)+(4\ 1\ 5\ 2)\} \\
&= \{E-(2\ 5)-(1\ 4)+(1\ 4)(2\ 5)+(4\ 5)-(4\ 5\ 2)-(5\ 4\ 1)+(4\ 1\ 5\ 2)\} \\
&\quad +\{(1\ 2)-(1\ 2\ 5)-(2\ 1\ 4)+(1\ 4\ 2\ 5)+(1\ 2)(4\ 5)-(1\ 2\ 4\ 5)-(2\ 1\ 5\ 4) \\
&\quad +(1\ 5)(2\ 4)\}+\{(1\ 3)-(1\ 3)(2\ 5)-(3\ 1\ 4)+(3\ 1\ 4)(2\ 5)+(1\ 3)(4\ 5) \\
&\quad -(1\ 3)(4\ 5\ 2)-(3\ 1\ 5\ 4)+(3\ 1\ 5\ 2\ 4)\}+\{(2\ 3)-(3\ 2\ 5)-(2\ 3)(1\ 4) \\
&\quad +(1\ 4)(3\ 2\ 5)+(2\ 3)(4\ 5)-(3\ 2\ 4\ 5)-(2\ 3)(5\ 4\ 1)+(3\ 2\ 4\ 1\ 5)\} \\
&\quad +\{(1\ 2\ 3)-(1\ 2\ 5\ 3)-(2\ 3\ 1\ 4)+(1\ 4\ 2\ 5\ 3)+(1\ 2\ 3)(4\ 5)-(1\ 2\ 4\ 5\ 3) \\
&\quad -(2\ 3\ 1\ 5\ 4)+(2\ 4)(1\ 5\ 3)\}+\{(3\ 2\ 1)-(3\ 2\ 5\ 1)-(3\ 2\ 1\ 4) \\
&\quad +(3\ 2\ 5\ 1\ 4)+(3\ 2\ 1)(4\ 5)-(3\ 2\ 4\ 5\ 1)-(3\ 2\ 1\ 5\ 4)+(1\ 5)(3\ 2\ 4)\}
\end{aligned} \tag{6.61}
$$

由置换群共轭元素的性质 (6.13) 知, 若置换 S 把杨表 $\mathcal{Y}$ 变成杨表 $\mathcal{Y}'$, 则相应的杨算符及其横向置换和纵向置换都满足共轭关系 $\mathcal{Y}'=S\mathcal{Y}S^{-1}$, $P'=SPS^{-1}$, $Q'=SQS^{-1}$. 由两个给定的杨表, 这样的置换变换 S 是很容易确定的. 只要按相同的次序, 把杨表 $\mathcal{Y}$ 的填数列在 S 的第一行, 把杨表 $\mathcal{Y}'$ 的填数列在 S 的第二行, 就唯一确定了这置换变换 S. 例如

杨表 $\mathcal{Y}=$

1	3	5
2	4	

杨表 $\mathcal{Y}'=$

1	2	3
4	5	

$$
S=\begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 & 2 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{pmatrix}
$$

$$
S\mathcal{Y}S^{-1}=\mathcal{Y}', \qquad S\mathcal{P}S^{-1}=\mathcal{P}', \qquad S\mathcal{Q}S^{-1}=\mathcal{Q}' \tag{6.62}
$$

根据杨算符的定义式 (6.60), 也可直接从式 (6.61) 中看到, 杨算符是置换群元素的代数和, 是置换群群代数的矢量

$$
\mathcal{Y}=\sum_{R\in S_n} F(R)R \tag{6.63}
$$

其中, $F(R)$ 只能取 1, -1 和 0. 横向置换 P 和恒元 E 的系数为 1, 纵向置换 Q 和 PQ 的系数为 Q 的置换宇称 $\delta(Q)$

$$
F(E)=F(P)=\delta(Q)F(Q)=\delta(Q)F(PQ)=1 \tag{6.64}
$$

这些系数不为零的置换群元素称为属于杨表 $\mathcal{Y}$ 的元素, 也称属于杨算符 $\mathcal{Y}$ 的元素, 而系数为零的其他元素则称为不属于杨表 $\mathcal{Y}$ 或不属于杨算符 $\mathcal{Y}$ 的元素. 但是任意

给出一个置换变换 R, 如何判别它是否属于某杨表 $\mathcal{Y}$ 或某杨算符 $\mathcal{Y}$ 呢? 下面两小节会提供一些简单的判据.

四、杨算符的基本对称性质

对给定的杨表, 在按式 (6.59) 写出横算符 $\mathcal{P}$ 时, 所有横向置换都已加起来, 因而根据群的重排定理, 它对左乘或右乘横向置换保持不变. 同理, 纵算符 $\mathcal{Q}$ 对左乘或右乘纵向置换, 除了产生一个置换字称的因子外, 也保持不变

$$P\mathcal{P} = \mathcal{P}P = \mathcal{P}\ , \qquad Q\mathcal{Q} = \mathcal{Q}Q = \delta(Q)\mathcal{Q} \tag{6.65}$$

而杨算符 $\mathcal{Y}$ 只能对左乘横向置换保持不变, 对右乘纵向置换产生一个置换字称

$$P\mathcal{Y} = \delta(Q)\mathcal{Y}Q = \delta(Q)P\mathcal{Y}Q = \mathcal{Y} \tag{6.66}$$

这是杨算符最基本的对称性质. 除了 $F(E) = 1$ 外, 杨算符展开式系数的关系式 (6.64), 可以直接从此对称性质推得. 设 $\mathcal{Y}$ 有展开式 (6.63), 左乘 P^{-1} 或右乘 Q^{-1}, 得

$$\begin{aligned}
P^{-1}\mathcal{Y} &= \sum_{R\in \mathrm{S}_n} F(R)P^{-1}R = \sum_{S\in \mathrm{S}_n} F(PS)S \\
&= \mathcal{Y} = \sum_{S\in \mathrm{S}_n} F(S)S \\
\mathcal{Y}Q^{-1} &= \sum_{R\in \mathrm{S}_n} F(R)RQ^{-1} = \sum_{S\in \mathrm{S}_n} F(SQ)S \\
&= \delta(Q)\mathcal{Y} = \sum_{S\in \mathrm{S}_n} \delta(Q)F(S)S
\end{aligned}$$

故

$$F(S) = F(PS) = \delta(Q)F(SQ) = \delta(Q)F(PSQ) \tag{6.67}$$

取 $S = E$, 并添上条件 $F(E) = 1$, 就得到式 (6.64).

福克 (Fock) 发现杨算符还有另一个重要对称性质, 称为福克条件.

设杨表 $\mathcal{Y}$ 中第 j 行和第 j' 行分别有 λ 和 λ' 格, $\lambda \geqslant \lambda'$, 填入这两行的数分别记作 a_μ 和 b_ν, 则

$$\left\{E + \sum_{\mu=1}^{\lambda} (a_\mu\ b_\nu)\right\} \mathcal{Y} = 0 \tag{6.68}$$

设杨表 $\mathcal{Y}$ 中第 k 列和第 k' 列分别有 τ 和 τ' 格, $\tau \geqslant \tau'$, 填入这两列的数分别记作 c_μ 和 d_ν, 则

$$\mathcal{Y}\left\{E - \sum_{\mu=1}^{\tau} (c_\mu\ d_\nu)\right\} = 0 \tag{6.69}$$

下面举个例子说明式中数字的填充位置.

a_1	a_2	a_3	a_4	a_5
	b_ν			

	c_1			
	c_2	d_ν		
	c_3			
	c_4			
	c_5			

证明　两个福克条件的证明方法是类似的, 我们以式 (6.68) 为例来证明. 用 $(\sum P_j)$ 和 $(\sum P_{j'})$ 分别表第 j 行和第 j' 行所有横向置换之和, 而 $\mathcal{P}'$ 表不含此两行数字的所有横向置换之和, 则

$$\mathcal{Y} = \mathcal{P}\mathcal{Q} = \left(\sum P_j\right)\left(\sum P_{j'}\right)\mathcal{P}'\mathcal{Q}$$

$(\sum P_j)$ 共含 $\lambda!$ 项, 它是填在第 j 行的数字的所有置换变换之和, 称为这些数字的全对称算符. 将它右乘到 $\left\{E + \sum_\mu (a_\mu\ b_\nu)\right\}$ 上, 得 $(\lambda+1)!$ 项. 容易看出这 $(\lambda+1)!$ 项中没有重复元素, 因而它是 $\lambda+1$ 个数字的所有置换变换之和, 是 $\lambda+1$ 个数字的全对称算符. 这 $\lambda+1$ 个数字, 除了排在第 j 行的数字外, 还添上数字 b_ν. 把这全对称算符记作 $[\sum P_j(b_\nu)]$. 当把 $(\sum P_{j'})$ 中的每一项 $P_{j'}$ 从这对称算符的右面移到左面去时, 根据式 (6.14), 其效果只是把对称算符中的 b_ν 换成第 j' 行的另一个数字 b_ρ, b_ρ 也可能和 b_ν 相同

$$\left[\sum P_j(b_\nu)\right] P_{j'} = P_{j'}\left[\sum P_j(b_\rho)\right] \tag{6.70}$$

这算符可以与 $\mathcal{P}'$ 对易, 而容易证明它与 $\mathcal{Q}$ 相乘得零. 事实上, 由于 $\lambda \geqslant \lambda'$, 在第 j 行必存在与 b_ρ 在同一列的数字 a_ρ. 对换 $(a_\rho\ b_\rho)$ 与对称算符 $[\sum P_j(b_\rho)]$ 相乘保持后者不变, 但与 $\mathcal{Q}$ 相乘则改变 $\mathcal{Q}$ 的符号

$$\left[\sum P_j(b_\rho)\right]\mathcal{Q} = \left[\sum P_j(b_\rho)\right](a_\rho\ b_\rho)\mathcal{Q} = -\left[\sum P_j(b_\rho)\right]\mathcal{Q} = 0 \tag{6.71}$$

证完.

福克条件中并不要求 $j < j'$, 但当 $j < j'$ 时必有 $\lambda \geqslant \lambda'$. 反之, 当 $j > j'$ 时还是有可能 $\lambda = \lambda'$. 例如, 上图中, 若把 b_ν 取在第一行, 福克条件 (6.68) 仍是成立的. 对式 (6.69) 情况也类似.

从福克条件 (6.68) 的证明中我们看到, 从杨算符 $\mathcal{Y}$ 的左面看, 杨算符只对第 j 行的 λ 个客体是全对称的, 现在从左面乘上因子 $\left\{E + \sum_\mu (a_\mu\ b_\nu)\right\}$, 等于强迫 b_ν 和第 j 行客体, 共 $\lambda+1$ 个客体全对称化, 福克条件 (6.68) 指出这样做会得零. 福克条件 (6.69) 则指出, 从杨算符 $\mathcal{Y}$ 的右面, 强迫 d_ν 和第 k 列客体, 共 $\tau+1$ 个客体全反对称化, 这样做也会得零.

五、杨算符的乘积

如果杨算符 $\mathcal{Y}'$ 和 $\mathcal{Y}$ 相乘得零, 即

$$\mathcal{Y}'\mathcal{Y} = 0 \tag{6.72}$$

并不意味着交换次序后相乘仍得零, 即

$$\mathcal{Y}\mathcal{Y}' = 0 \tag{6.73}$$

只有当两式都成立时, 才称两杨算符正交. 式 (6.71) 已提供判断两杨算符相乘为零的一个方法.

定理四 若 T_0 同时是杨算符 $\mathcal{Y} = \mathcal{P}\mathcal{Q}$ 的横向对换和杨算符 $\mathcal{Y}' = \mathcal{P}'\mathcal{Q}'$ 的纵向对换, 则

$$\mathcal{Y}'\mathcal{Y} = 0\ , \qquad \mathcal{Q}'\mathcal{P} = 0\ . \tag{6.74}$$

证明 $\mathcal{Q}'\mathcal{P} = \mathcal{Q}'T_0\mathcal{P} = -\mathcal{Q}'\mathcal{P} = 0$. 证完.

这里和以后, 加下标零以强调 T_0 是对换. 如果存在一对数 a 和 b, 它们在杨表 $\mathcal{Y}$ 中填在同一行, 而在杨表 $\mathcal{Y}'$ 中填在同一列, 则 $(a\ b)$ 就是定理所需要的 T_0, 因而式 (6.74) 成立. 这是定理四的另一种表述. 下面的推论, 关键在于要找出这样的一对数.

推论一 若杨图 $\mathcal{Y}'$ 小于杨图 $\mathcal{Y}$, 则杨算符 $\mathcal{Y}'$ 左乘杨算符 $\mathcal{Y}$ 得零

$$\mathcal{Y}'\mathcal{Y} = 0\ , \qquad \text{当杨图 } \mathcal{Y}' \text{ 小于杨图 } \mathcal{Y}\ . \tag{6.75}$$

证明 设杨图 $\mathcal{Y}'$ 和杨图 $\mathcal{Y}$ 的配分数分别为 $[\lambda']$ 和 $[\lambda]$, 当 $i < j$ 时 $\lambda'_i = \lambda_i$, 但 $\lambda'_j < \lambda_j$. 在填入杨表 $\mathcal{Y}$ 的前 $j-1$ 行的数字中, 如能找到一对数 a 和 b, 它们在杨表 $\mathcal{Y}$ 中填在同一行, 而在杨表 $\mathcal{Y}'$ 中填在同一列, 则根据定理四, 式 (6.75) 成立. 反之, 如果这样的数不存在, 则凡填在杨表 $\mathcal{Y}$ 前 $j-1$ 行中每一行的数字, 都可以通过杨表 $\mathcal{Y}'$ 的纵向置换, 在杨表 $\mathcal{Y}'$ 中, 也把它们变到相同行来. 换言之, 存在杨表 $\mathcal{Y}'$ 的纵向置换 Q', 经过它的变换, 杨表 $\mathcal{Y}'$ 变成杨表 $\mathcal{Y}''$, 而在杨表 $\mathcal{Y}''$ 和杨表 $\mathcal{Y}$ 的前 $j-1$ 行, 各对应行包含的数字都相同. 注意

$$\mathcal{Y}'' = Q'\mathcal{Y}'Q'^{-1} = \delta(Q')Q'\mathcal{Y}'\ , \qquad \mathcal{Y}' = \delta(Q')Q'^{-1}\mathcal{Y}''$$

现在填入杨表 $\mathcal{Y}$ 的第 j 行的数字, 都填在杨表 $\mathcal{Y}''$ 的第 j 行或更下面的行, 既然 $\lambda'_j < \lambda_j$, 至少有一对数字 a 和 b, 在杨表 $\mathcal{Y}$ 中填在第 j 行, 而在杨表 $\mathcal{Y}''$ 中填在同一列, 从而 $\mathcal{Y}''\mathcal{Y} = 0$, 因而 $\mathcal{Y}'\mathcal{Y} = 0$. 证完.

推论二 对同一个杨图, 若正则杨表 $\mathcal{Y}'$ 大于正则杨表 $\mathcal{Y}$, 则杨算符 $\mathcal{Y}'$ 左乘杨算符 $\mathcal{Y}$ 得零

$$\mathcal{Y}'\mathcal{Y} = 0\ , \qquad \text{当正则杨表 } \mathcal{Y}' \text{ 大于正则杨表 } \mathcal{Y}\ . \tag{6.76}$$

证明　从第一行开始, 自左至右逐个比较杨表 $\mathcal{Y}$ 和杨表 $\mathcal{Y}'$ 中的对应填数, 如果都一样, 再接着比较第二行, 第三行, 设第一对不相同的数出现在第 i 行第 j 列, 在杨表 $\mathcal{Y}'$ 中填的数是 a, 在杨表 $\mathcal{Y}$ 中是 b, 且 $a > b$. 查看数 b 在杨表 $\mathcal{Y}'$ 中填在哪里. 由于杨表 $\mathcal{Y}'$ 是正则杨表, b 只能填在 a 的左下方, 即行数比 i 大, 列数比 j 小, 设为第 k 列, $k < j$. 这也说明 $j > 1$. 在两个杨表中, 填在第 i 行第 k 列的数是相同的, 设为 c, 则一对数 b 和 c, 在杨表 $\mathcal{Y}'$ 中填在同一列, 在杨表 $\mathcal{Y}$ 中填在同一行, 根据定理四, 式 (6.76) 成立. 证完.

推论三　对同一杨图, 设填在杨表 $\mathcal{Y}'$ 同一列的数字在杨表 $\mathcal{Y}$ 中都不填在同一行, 则把杨表 $\mathcal{Y}$ 变成杨表 $\mathcal{Y}'$ 的置换 R 必属于杨表 $\mathcal{Y}$, 也属于杨表 $\mathcal{Y}'$.

证明　先做点说明. 所谓 R 属于杨表 $\mathcal{Y}$, 是指 R 能表为杨表 $\mathcal{Y}$ 的横向置换 P 和纵向置换 Q 的乘积, $R = PQ$. 如果凡填在杨表 $\mathcal{Y}'$ 同一列的数字, 都不填在杨表 $\mathcal{Y}$ 的同一行, 那么凡填在杨表 $\mathcal{Y}$ 同一行的数字, 也都不填在杨表 $\mathcal{Y}'$ 的同一列.

既然填入杨表 $\mathcal{Y}'$ 同一列的数字在杨表 $\mathcal{Y}$ 中都不填在同一行, 则必可找到杨表 $\mathcal{Y}$ 的一个横向置换 P, 它把杨表 $\mathcal{Y}$ 变成杨表 $\mathcal{Y}''$, 使杨表 $\mathcal{Y}''$ 和杨表 $\mathcal{Y}'$ 每一对应列包含的数字相同. 因此可通过杨表 $\mathcal{Y}''$ 的纵向置换 Q'' 把杨表 $\mathcal{Y}''$ 变成杨表 $\mathcal{Y}'$. 但杨表 $\mathcal{Y}''$ 的纵向置换 Q'' 可由杨表 $\mathcal{Y}$ 的纵向置换 Q 经变换 P 得到, $Q'' = PQP^{-1}$. 归结起来, 杨表 $\mathcal{Y}'$ 可由杨表 $\mathcal{Y}$ 经两次变换 P 和 Q'' 得到, $R = Q''P = PQ$. 又有 $R = RRR^{-1} = (RPR^{-1})(RQR^{-1})$. 证完.

从证明过程可以知道推论三的逆定理也成立. 如果 R 属于杨表 $\mathcal{Y}$, $R = PQ = \left(PQP^{-1}\right)P$, 杨表 $\mathcal{Y}$ 经过 R 变换得到杨表 $\mathcal{Y}'$, 则填在杨表 $\mathcal{Y}'$ 同一列的数字在杨表 $\mathcal{Y}$ 中都不填在同一行. 推论三的逆否定理是, 如果 R 不属于杨表 $\mathcal{Y}$, 杨表 $\mathcal{Y}$ 经 R 变换得杨表 $\mathcal{Y}'$, 则至少有一对数字 a 和 b, 它们填在杨表 $\mathcal{Y}$ 的同一行, 而填在杨表 $\mathcal{Y}'$ 中的同一列. 因为

$$\mathcal{Y}' = R\mathcal{Y}R^{-1} \tag{6.77}$$

所以

$$0 = R^{-1}\mathcal{Y}'\mathcal{Y} = \mathcal{Y}R^{-1}\mathcal{Y}\,, \qquad \text{当}R\text{不属于}\mathcal{Y} \tag{6.78}$$

这是不属于杨表 $\mathcal{Y}$ 的置换的一个重要性质. 推论四给出更方便的判别条件.

推论四　置换群元素 R 不属于杨表 $\mathcal{Y}$ 的充要条件是 R 可表成

$$R = P_0RQ_0 \tag{6.79}$$

其中, P_0 和 Q_0 分别是杨表 $\mathcal{Y}$ 的某一个横向对换和纵向对换.

证明　若 $R = P_0RQ_0$, 则由式 (6.67), 得

$$F(R) = F\left(P_0RQ_0\right) = -F(R) = 0$$

即 R 不属于杨表 $\mathcal{Y}$. 反之, 若 R 不属于杨表 $\mathcal{Y}$, 经 R 变换后, 杨表 $\mathcal{Y}$ 变成杨表 $\mathcal{Y}'$, 则由推论三的逆否定理知, 至少存在一个属于杨表 $\mathcal{Y}$ 的横向对换 P_0, 它同时是杨表 $\mathcal{Y}'$ 的纵向对换 $Q_0' = P_0$, 而 Q_0' 可由 $\mathcal{Y}$ 的纵向对换 Q_0 经 R 变换得到, $P_0 = Q_0' = RQ_0R^{-1}$, 由此立刻推得式 (6.79). 证完.

6.4 置换群的不可约表示

这一节我们将证明, 杨算符与置换群群代数的原始幂等元成比例, 由杨算符方法可以构造置换群群代数的标准基, 并提供一个简便的方法, 计算置换群的不等价不可约表示矩阵.

一、置换群群代数的原始幂等元

先回忆一下群代数幂等元的性质. e_j 是原始幂等元的充要条件是

$$e_je_j = e_j \ , \qquad e_jte_j = \lambda_t e_j \tag{6.80}$$

对与原始幂等元成比例的矢量, 前一条件可改为

$$e_je_j = \lambda_E e_j \neq 0 \tag{6.81}$$

两原始幂等元 e_j 和 e_i 等价的充要条件是存在群元素 S, 使下式成立

$$e_jSe_i \neq 0 \tag{6.82}$$

我们要证明杨算符 $\mathcal{Y}$ 与置换群原始幂等元成比例, 并讨论它们产生的左理想的等价性.

定理五 如果置换群群代数的矢量 $\mathcal{X}$ 满足

$$P\mathcal{X} = \delta(Q)\mathcal{X}Q = \mathcal{X} \tag{6.83}$$

其中, P 和 Q 是杨算符 $\mathcal{Y}$ 的任意横向置换和纵向置换, 则 $\mathcal{X}$ 与杨算符 $\mathcal{Y}$ 只差常系数 λ

$$\mathcal{X} = \lambda\mathcal{Y} \ . \tag{6.84}$$

证明 设

$$\mathcal{X} = \sum_{R\in \mathrm{S}_n} F_1(R)R$$

根据式 (6.83), 模仿式 (6.67) 的证明, 得

$$F_1(S) = F_1(PS) = \delta(Q)F_1(SQ) = \delta(Q)F_1(PSQ)$$

取 $S=E$, 并令 $F_1(E)=\lambda$, 得

$$\lambda=F_1(E)=F_1(P)=\delta(Q)F_1(Q)=\delta(Q)F_1(PQ)$$

对于不属于杨算符 $\mathcal{Y}$ 的置换 R, 由定理四的推论四得

$$F_1(R)=F_1(P_0RQ_0)=-F_1(R)=0$$

与式 (6.64) 比较, 得式 (6.84). 证完.

由杨算符 $\mathcal{Y}$ 的对称性质 (6.66) 立刻得到下面推论.

推论一　设 t 是置换群群代数的任意矢量, 则

$$\mathcal{Y}t\mathcal{Y}=\lambda_t\mathcal{Y} \tag{6.85}$$

其中, λ_t 是依赖于 t 的数, 可以为零.

推论二　杨算符 $\mathcal{Y}$ 的平方不为零

$$\mathcal{Y}\mathcal{Y}=\lambda\mathcal{Y}\neq 0\ . \tag{6.86}$$

证明　前一个等式是已知的, 这里要证明 λ 不等于零, 并计算 λ.

由杨算符 $\mathcal{Y}$ 产生的右理想, $\mathcal{R}_Y=\mathcal{Y}\mathcal{L}$, 至少包含杨算符本身, 因而它的维数 $f\neq 0$. 取置换群群代数 $\mathcal{L}$ 的一组基 x_μ, 其中前 f 个基属于右理想 $\mathcal{R}_Y$, 也是此右理想的一组基, 而后面 $n!-f$ 个基则不属于此右理想. 注意此右理想 $\mathcal{R}_Y$ 是由杨算符 $\mathcal{Y}$ 生成的, 右理想中的任何矢量, 包括基在内, 都可看成杨算符 $\mathcal{Y}$ 和群代数中另一矢量的乘积

$$x_\mu=\mathcal{Y}y_\mu\ ,\qquad 1\leqslant\mu\leqslant f \tag{6.87}$$

从两个角度来计算乘积 $\mathcal{Y}x_\mu$. 一方面, 把它看成杨算符 $\mathcal{Y}$ 左乘到基 x_μ 上, 得到基的线性组合, 组合系数是杨算符 $\mathcal{Y}$ 在这组基中的矩阵形式

$$\mathcal{Y}x_\mu=\sum_{\nu=1}^{n!}x_\nu\overline{D}_{\nu\mu}(\mathcal{Y}) \tag{6.88}$$

$\overline{D}(\mathcal{Y})$ 也就是杨算符 $\mathcal{Y}$ 在群代数中的表示矩阵, 这表示等价于正则表示, 因而只有恒元才有非零矩阵迹

$$\mathrm{Tr}\overline{D}(\mathcal{Y})=\mathrm{Tr}\overline{D}(E)=n!$$

另一方面, 把 $\mathcal{Y}x_\mu$ 看成 x_μ 右乘到杨算符 $\mathcal{Y}$ 上, 得到右理想 $\mathcal{R}_Y$ 中的一个矢量, 可以表为此右理想的基的线性组合. 也就是说, 式 (6.88) 的求和指标 ν 只在 1 到 f 之间取值

$$\overline{D}_{\nu\mu}(\mathcal{Y})=0\ ,\qquad 当\ \ \nu>f$$

而且在 $\mu \leqslant f$ 时, 根据式 (6.87) 和 (6.86), 得

$$\mathcal{Y}x_\mu = \mathcal{Y}\mathcal{Y}y_\mu = \lambda\mathcal{Y}y_\mu = \lambda x_\mu , \qquad \mu \leqslant f$$

可见当 $\mu \leqslant f$ 时 $\overline{D}_{\nu\mu}(\mathcal{Y}) = \delta_{\nu\mu}\lambda$, 即 $\overline{D}(\mathcal{Y})$ 取如下形式

$$\overline{D}(\mathcal{Y}) = \begin{pmatrix} \lambda\mathbf{1} & M \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \qquad \mathrm{Tr}\overline{D}(\mathcal{Y}) = f\lambda$$

把两个方法计算的矩阵迹做比较, 由于 $f \neq 0$, 得

$$\lambda = n!/f \neq 0 \tag{6.89}$$

证完.

推论三 $a = (f/n!)\,\mathcal{Y}$ 是置换群的原始幂等元.

推论四 对同一杨图, 设填在杨表 $\mathcal{Y}'$ 同一列的数字在杨表 $\mathcal{Y}$ 中都不填在同一行, 则相应杨算符乘积 $\mathcal{Y}'\mathcal{Y} \neq 0$.

证明 在定理给出的条件下, 根据定理四推论三, 把杨表 $\mathcal{Y}$ 变成杨表 $\mathcal{Y}'$ 的置换 R 可表为杨表 $\mathcal{Y}$ 的横向置换 P 和纵向置换 Q 的乘积, 因此

$$\mathcal{Y}'\mathcal{Y} = R\mathcal{Y}Q^{-1}P^{-1}\mathcal{Y} = \delta(Q)R\mathcal{Y}\mathcal{Y} = \delta(Q)\lambda R\mathcal{Y} \neq 0 \tag{6.90}$$

其中, λ 由 $\mathcal{Y}^2 = \lambda\mathcal{Y}$ 定出.

推论五 由杨算符 $\mathcal{Y}$ 和 $\mathcal{Y}'$ 生成的最小左理想等价的充要条件是它们对应的杨图相同.

证明 如果杨图 $\mathcal{Y}$ 和 $\mathcal{Y}'$ 相同, 则必存在置换 R, 把杨表 $\mathcal{Y}$ 变成杨表 $\mathcal{Y}'$, 使

$$\mathcal{Y}' = R\mathcal{Y}R^{-1} , \qquad \mathcal{Y}'R\mathcal{Y} = R\mathcal{Y}\mathcal{Y} \neq 0$$

反之, 如果杨图 $\mathcal{Y}$ 和 $\mathcal{Y}'$ 不相同, 则不失普遍性, 可设杨图 $\mathcal{Y}$ 大于杨图 $\mathcal{Y}'$. 对任何置换 R, 设 $R\mathcal{Y} = \mathcal{Y}''R$, 则杨图 $\mathcal{Y}''$ 和杨图 $\mathcal{Y}$ 相同, 它仍大于杨图 $\mathcal{Y}'$, 由定理四的推论一, $\mathcal{Y}'R\mathcal{Y} = \mathcal{Y}'\mathcal{Y}''R = 0$. 证完.

因此, 置换群的不等价不可约表示可以用杨图 $[\lambda]$ 来标记. 置换群 S_n 不等价不可约表示的数目等于 n 的不同配分数的数目, 也就是置换群的类数. 反过来, 又根据定理一, 得到推论六.

推论六 对应不同杨图的杨算符 $\mathcal{Y}$ 和 $\mathcal{Y}'$ 互相正交, $\mathcal{Y}'\mathcal{Y} = \mathcal{Y}\mathcal{Y}' = 0$.

二、置换群正交的原始幂等元

对应不同杨图的杨算符是互相正交的, 但对应同一杨图不同正则杨表的杨算符不一定正交. 虽然定理四的推论二告诉我们, 在一定的条件下, $\mathcal{Y}'\mathcal{Y} = 0$, 但在此条

件不满足时, 确实能找到正则杨算符乘积不为零的例子. 这种例子只有在 $n \geqslant 5$ 的置换群 S_n 中才出现. 在 $n = 5$ 时, 有两个杨图, $[3,2]$ 和 $[2,2,1]$, 它们的正则杨算符不完全正交. 我们以杨图 $[3,2]$ 为例来说明. 杨图 $[3,2]$ 有五个不同的正则杨表, 按它们的大小, 自小而大排列如下

杨表$\mathcal{Y}_1$

1	2	3
4	5	

杨表$\mathcal{Y}_2$

1	2	4
3	5	

杨表$\mathcal{Y}_3$

1	2	5
3	4	

杨表$\mathcal{Y}_4$

1	3	4
2	5	

杨表$\mathcal{Y}_5$

1	3	5
2	4	

(6.91)

当 $\mu > \nu$ 时, $\mathcal{Y}_\mu \mathcal{Y}_\nu = 0$. 当 $\mu < \nu$ 时, 要逐对检查, 有没有这样的情况, 就是填在杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 同一行的数字, 都不填在杨表 $\mathcal{Y}_\mu$ 的同一列. 如发生这样的情况, 就说明它们的乘积不等于零. 检查结果, 只有一对杨算符乘积不为零

$$\mathcal{Y}_1 \mathcal{Y}_5 \neq 0 \tag{6.92}$$

把杨表 $\mathcal{Y}_5$ 变成杨表 $\mathcal{Y}_1$ 的置换是 R_{15}

$$\begin{aligned} R_{15} &= \begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 & 2 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{pmatrix} = (3\ 2\ 4\ 5) = (2\ 4)\,(4\ 5\ 3) \\ &= (2\ 4)\,(5\ 3)\ \ (3\ 4) = P_5 Q_5 = (4\ 5)\,(3\ 2)\ \ (2\ 5) = P_1 Q_1, \\ P_5 &= (2\ 4)\,(5\ 3), \qquad Q_5 = (3\ 4), \qquad P_1 = (4\ 5)(3\ 2), \qquad Q_1 = (2\ 5) \end{aligned} \tag{6.93}$$

先把 R_{15} 化为没有公共客体的轮换乘积, 然后用切断轮换的方法把杨表 $\mathcal{Y}_5$ 的横向置换尽量往左移, 纵向置换尽量往右移, 最后把 R_{15} 分解为杨表 $\mathcal{Y}_5$ 的横向置换 P_5 和纵向置换 Q_5 的乘积, 或分解为杨表 $\mathcal{Y}_1$ 的横向置换 P_1 和纵向置换 Q_1 的乘积. 这方法是这类分解的标准方法.

对于给定的杨图, 我们希望把正则杨算符做适当的组合, 使它们互相正交. 这里的组合指在正则杨算符的左面或右面乘上一个适当的群代数矢量. 为了以后的方便, 我们重点讨论右乘矢量的办法. 在上面例子中, 可取

$$\mathcal{Y}_1' = \mathcal{Y}_1 \left[E - P_5\right] , \qquad \mathcal{Y}_\nu' = \mathcal{Y}_\nu , \qquad \nu > 1 \tag{6.94}$$

因为 $\mathcal{Y}_1 P_5 = \mathcal{Y}_1 R_{15} Q_5^{-1} = \delta(Q_5) R_{15} \mathcal{Y}_5$, 所以当 $\mu < 5$ 时 $\mathcal{Y}_1' \mathcal{Y}_\mu = \mathcal{Y}_1 \mathcal{Y}_\mu$. 而 $\mathcal{Y}_1' \mathcal{Y}_5 = \mathcal{Y}_1 (E - E) \mathcal{Y}_5 = 0$.

一般说来, 对于给定的杨图 $[\lambda]$, 如果 d 个正则杨算符 $\mathcal{Y}_\mu$ 不完全正交, 我们希望选取合适的群代数矢量 y_μ 右乘到杨算符 $\mathcal{Y}_\mu$ 上, 满足

$$e_\mu = \frac{f}{n!}\ \mathcal{Y}_\mu y_\mu\ , \qquad e_\mu e_\nu = \delta_{\mu\nu} e_\mu \tag{6.95}$$

其中, f 是杨算符 $\mathcal{Y}_\mu$ 产生左 (或右) 理想的维数. 既然杨图 $[\lambda]$ 已经选定, 为了书写简单, 这里省略了标记杨图的指标 $[\lambda]$.

式 (6.95) 就是要求 y_μ 满足

$$\begin{aligned} &\mathcal{Y}_\mu y_\mu \mathcal{Y}_\nu = \mathcal{P}_\mu \mathcal{Q}_\mu y_\mu \mathcal{P}_\nu \mathcal{Q}_\nu = \delta_{\mu\nu} \mathcal{Y}_\mu \mathcal{Y}_\mu \\ &\mathcal{Q}_\mu y_\mu \mathcal{P}_\nu = \delta_{\mu\nu} \mathcal{Q}_\mu \mathcal{P}_\mu , \qquad 1 \leqslant \mu \leqslant d , \qquad 1 \leqslant \nu \leqslant d \end{aligned} \tag{6.96}$$

定义置换 $R_{\mu\nu}$, 它把正则杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 变成正则杨表 $\mathcal{Y}_\mu$

$$\begin{aligned} &R_{\mu\rho} R_{\rho\nu} = R_{\mu\nu} , \qquad R_{\mu\mu} = E \\ &R_{\mu\nu} \mathcal{Y}_\nu = \mathcal{Y}_\mu R_{\mu\nu} , \qquad R_{\mu\nu} \mathcal{P}_\nu = \mathcal{P}_\mu R_{\mu\nu} , \qquad R_{\mu\nu} \mathcal{Q}_\nu = \mathcal{Q}_\mu R_{\mu\nu} \end{aligned} \tag{6.97}$$

由定理四的推论三

$$R_{\mu\nu} = P_\nu^{(\mu)} Q_\nu^{(\mu)} = \left(R_{\mu\nu} P_\nu^{(\mu)} R_{\mu\nu}^{-1} \right) \left(R_{\mu\nu} Q_\nu^{(\mu)} R_{\mu\nu}^{-1} \right) = \overline{P}_\mu^{(\nu)} \overline{Q}_\mu^{(\nu)} , \qquad \text{当} \ \mathcal{Y}_\mu \mathcal{Y}_\nu \neq 0 \tag{6.98}$$

$P_\nu^{(\mu)}$ 和 $Q_\nu^{(\mu)}$ 分别是杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 的横向置换和纵向置换, 用带括号的上指标表明它们与杨表 $\mathcal{Y}_\mu$ 有关. 同理, $\overline{P}_\mu^{(\nu)}$ 和 $\overline{Q}_\mu^{(\nu)}$ 分别是杨表 $\mathcal{Y}_\mu$ 的横向置换和纵向置换, 用带括号的上指标表明它们与杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 有关. 令

$$P_{\mu\nu} = \begin{cases} P_\nu^{(\mu)} , & \text{当} \ \mathcal{Y}_\mu \mathcal{Y}_\nu \neq 0 \\ 0 , & \text{当} \ \mathcal{Y}_\mu \mathcal{Y}_\nu = 0 \end{cases} \tag{6.99}$$

显然, 当 $\mathcal{Y}_\mu \mathcal{Y}_\nu \neq 0$ 时, 有

$$\begin{aligned} &P_{\mu\nu} \mathcal{Q}_\nu = R_{\mu\nu} \mathcal{Q}_\nu \left(Q_\nu^{(\mu)} \right)^{-1} = \mathcal{Q}_\mu P_{\mu\nu}, \\ &\mathcal{P}_\nu P_{\mu\nu} = P_{\mu\nu} \mathcal{P}_\nu = \mathcal{P}_\nu, \\ &\mathcal{Y}_\mu P_{\mu\nu} = R_{\mu\nu} \mathcal{Y}_\nu \left(Q_\nu^{(\mu)} \right)^{-1} = \delta(Q_\nu^{(\mu)}) R_{\mu\nu} \mathcal{Y}_\nu \end{aligned} \tag{6.100}$$

下面用数学归纳法证明, 下式定义的 y_μ 满足式 (6.96)

$$y_\mu = E - \sum_{\rho=\mu+1}^{d} P_{\mu\rho} y_\rho , \qquad y_d = E , \qquad \mu \leqslant d \tag{6.101}$$

y_μ 是按 μ 自大至小逐个定义的, 它是群元素的组合, 除了恒元项外, 其他项都是若干个 $-P_{\nu\rho}$ 的乘积.

证明 μ 等于 d 时式 (6.96) 显然成立. 现设当 $\mu > \tau$ 时式 (6.96) 成立, 要证

$\mu=\tau$ 时式 (6.96) 也成立.

$$\begin{aligned}\mathcal{Q}_\tau y_\tau \mathcal{P}_\nu &= \mathcal{Q}_\tau \mathcal{P}_\nu - \sum_{\rho=\tau+1}^{d} \mathcal{Q}_\tau P_{\tau\rho} y_\rho \mathcal{P}_\nu \\ &= \mathcal{Q}_\tau \mathcal{P}_\nu - \sum_{\rho=\tau+1}^{d} P_{\tau\rho} \mathcal{Q}_\rho y_\rho \mathcal{P}_\nu \\ &= \begin{cases} 0, & \text{当 } \nu<\tau \\ \mathcal{Q}_\tau \mathcal{P}_\tau, & \text{当 } \nu=\tau \\ \mathcal{Q}_\tau \mathcal{P}_\nu - P_{\tau\nu}\mathcal{Q}_\nu \mathcal{P}_\nu = 0, & \text{当 } \nu>\tau \end{cases}\end{aligned}$$

证完.

由式 (6.100) 不难看出

$$\mathcal{Y}_\mu y_\mu = \mathcal{Y}_\mu - \sum_{\mathcal{Y}_\mu \mathcal{Y}_\rho \neq 0} \delta(Q_\rho^{(\mu)}) R_{\mu\rho} \mathcal{Y}_\rho y_\rho = \sum_{\rho=\mu}^{d} t_\rho \mathcal{Y}_\rho \tag{6.102}$$

前式对 ρ 求和是在满足条件 $\mathcal{Y}_\mu \mathcal{Y}_\rho \neq 0$ 下进行的, 后式 t_ρ 是群代数的矢量, 可为零.

如果采用在杨算符 $\mathcal{Y}_\nu$ 上左乘群代数矢量 $\overline{y}_\nu$ 的方法来组合杨算符, 则取

$$\begin{gathered}\overline{Q}_{\mu\nu} = \begin{cases} \delta(\overline{Q}_\mu^{(\nu)})\overline{Q}_\mu^{(\nu)}, & \text{当 } \mathcal{Y}_\mu \mathcal{Y}_\nu \neq 0 \\ 0, & \text{当 } \mathcal{Y}_\mu \mathcal{Y}_\nu = 0 \end{cases} \\ \overline{y}_\nu = E - \sum_{\rho=1}^{\nu-1} \overline{y}_\rho \overline{Q}_{\rho\nu}, \qquad \overline{y}_1 = E, \qquad \overline{e}_\nu = \left(\frac{f}{n!}\right) \overline{y}_\nu \mathcal{Y}_\nu\end{gathered} \tag{6.103}$$

定理六　在与给定杨图 $[\lambda]$ 对应的单纯双边理想 $\mathcal{I}^{[\lambda]}$ 中, 下面 $d_{[\lambda]}$ 个幂等元 $e_\mu^{[\lambda]}$ 构成一组完备的正交的原始幂等元

$$e_\mu^{[\lambda]} = \frac{d_{[\lambda]}}{n!} \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} y_\mu^{[\lambda]}, \qquad 1 \leqslant \mu \leqslant d_{[\lambda]} \tag{6.104}$$

其中, $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}$ 是对应杨图 $[\lambda]$ 的正则杨算符, 恒元可按这些原始幂等元分解

$$E = \frac{1}{n!} \sum_{[\lambda]} d_{[\lambda]} \sum_{\mu=1}^{d_{[\lambda]}} \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} y_\mu^{[\lambda]}. \tag{6.105}$$

证明　对于给定杨图 $[\lambda]$, 我们已找到 $d_{[\lambda]}$ 个互相正交的原始幂等元 $e_\mu^{[\lambda]}$, 如式 (6.95) 所示. 由这些原始幂等元生成的不可约表示是 $f_{[\lambda]}$ 维的. 因为有限群正则表示约化中, 每个不可约表示的重数等于表示的维数, 所以

$$0 < d_{[\lambda]} \leqslant f_{[\lambda]}$$

但有限群不等价不可约表示的维数平方和等于群的阶数

$$\sum_{[\lambda]} f_{[\lambda]}^2 = n!$$

与式 (6.57) 比较知

$$d_{[\lambda]} = f_{[\lambda]}$$

因此, 我们找到的这组正交的原始幂等元 $e_\mu^{[\lambda]}$, 它们生成的左理想已充满了整个置换群群代数, 故有式 (6.105). 证完.

三、置换群不可约表示的表示矩阵

每一个杨图对应置换群的一个不可约表示. 现在我们要讨论, 对于给定的杨图, 如何选择标准基, 并在此标准基中如何具体计算置换群元素的表示矩阵. 因为杨图已经选定, 下面计算中略去标记杨图的指标 $[\lambda]$.

上一小节已经定义了置换 $R_{\nu\mu}$, 它把正则杨表 $\mathcal{Y}_\mu$ 变成正则杨表 $\mathcal{Y}_\nu$. 置换 $R_{\nu\mu}$ 满足式 (6.97). 由这些置换和正则杨算符, 可以定义如下 d^2 个基

$$\begin{aligned} b_{\nu\mu} &= e_\nu R_{\nu\mu} e_\mu = (d/n!)^2\, \mathcal{Y}_\nu y_\nu R_{\nu\mu} \mathcal{Y}_\mu y_\mu = (d/n!)^2\, \mathcal{Y}_\nu y_\nu \mathcal{Y}_\nu R_{\nu\mu} y_\mu \\ &= (d/n!)\, \mathcal{Y}_\nu R_{\nu\mu} y_\mu = (d/n!)\, R_{\nu\mu} \mathcal{Y}_\mu y_\mu = R_{\nu\mu} e_\mu \end{aligned} \tag{6.106}$$

请注意, $R_{\nu\mu} e_\mu$ 会自动产生左面的 e_ν. 由式 (6.97) 立刻可证明, 这组基满足标准基的条件式 (6.48) 和 (6.50)

$$b_{\nu\rho} b_{\lambda\mu} = \delta_{\rho\lambda} b_{\nu\mu}, \qquad b_{\mu\mu} = e_\mu = (d/n!)\, \mathcal{Y}_\mu y_\mu \tag{6.107}$$

因此这组基就是我们要找的置换群的标准基. 当 μ 固定时, d 个基 $b_{\nu\mu}$ 是左理想 $\mathcal{L}_\mu$ 的基, 当 ν 固定时, d 个基 $b_{\nu\mu}$ 是右理想 $\mathcal{R}_\nu$ 的基, 在这些基中得到的表示完全相同. 我们在左理想 $\mathcal{L}_1$ 中找置换群元素 S 的表示矩阵 $D(S)$

$$S b_{\mu 1} = \sum_{\nu}^{d} b_{\nu 1} D_{\nu\mu}(S) \tag{6.108}$$

左乘 $b_{1\nu}$, 得

$$D_{\nu\mu}(S) e_1 = b_{1\nu} S b_{\mu 1} = (d/n!)^2\, R_{1\nu} \mathcal{Y}_\nu y_\nu S \mathcal{Y}_\mu R_{\mu 1} y_1 \tag{6.109}$$

等式右面的量一定正比于 e_1. 为了化简此式, 把两个杨算符之间的量移开, 以消去一个杨算符. y_ν 是群元素的组合, 组合系数为 ± 1, 可以形式上把它写成

$$y_\nu = \sum_k \delta_k T_k, \qquad \delta_k = \pm 1 \tag{6.110}$$

其中, T_k 是置换群元素. 设 $(T_k)^{-1}$ 把杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 变成杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$, S 把杨表 $\mathcal{Y}_\mu$ 变成杨表 $\mathcal{Y}_\mu(S)$, 则式 (6.109) 化为

$$D_{\nu\mu}(S)e_1 = \sum_k \delta_k \left(d/n!\right)^2 R_{1\nu}T_k\mathcal{Y}_{\nu k}\mathcal{Y}_\mu(S)SR_{\mu 1}y_1 \tag{6.111}$$

现在的关键是计算这两个杨算符的乘积. 如果存在一对数, 它们在杨表 $\mathcal{Y}_\mu(S)$ 中填在同一行, 而在杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$ 中填在同一列, 则这两个杨算符乘积为零. 如果填在杨表 $\mathcal{Y}_\mu(S)$ 同一行的数, 在杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$ 中都不填在同一列, 则把杨表 $\mathcal{Y}_\mu(S)$ 变成杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$ 的置换 R 可表为杨表 $\mathcal{Y}_\mu(S)$ 的横向置换 $P_\mu(S)$ 和纵向置换 $Q_\mu(S)$ 的乘积

$$R = P_\mu(S)Q_\mu(S) = \left[RQ_\mu(S)R^{-1}\right]P_\mu(S) \equiv Q_{\nu k}P_\mu(S)$$

方括号里的置换是杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$ 的纵向置换 $Q_{\nu k}$, 它的逆变换可把杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$ 变成杨表 $\mathcal{Y}'$, 使杨表 $\mathcal{Y}'$ 和杨表 $\mathcal{Y}_\mu(S)$ 每一对应行包含的填数相同. 利用式 (6.90) (定理五推论四), 得

$$\begin{aligned}(d/n!)\,\mathcal{Y}_{\nu k}\mathcal{Y}_\mu(S)SR_{\mu 1} &= (d/n!)\,\mathcal{Y}_{\nu k}\delta(Q_{\nu k})Q_{\nu k}P_\mu(S)\mathcal{Y}_\mu(S)SR_{\mu 1}\\ &= (d/n!)\,\delta(Q_{\nu k})Q_{\nu k}P_\mu(S)\mathcal{Y}_\mu(S)\mathcal{Y}_\mu(S)SR_{\mu 1}\\ &= \delta(Q_{\nu k})Q_{\nu k}P_\mu(S)SR_{\mu 1}\mathcal{Y}_1\end{aligned}$$

代入式 (6.111) 得

$$D_{\nu\mu}(S)e_1 = \sum_k \delta_k\delta(Q_{\nu k})\,(d/n!)\left[R_{1\nu}T_kQ_{\nu k}P_\mu(S)SR_{\mu 1}\right]\mathcal{Y}_1 y_1 \tag{6.112}$$

我们来研究方括号里的置换. $R_{\mu 1}$ 把杨表 $\mathcal{Y}_1$ 变成杨表 $\mathcal{Y}_\mu$, S 把杨表 $\mathcal{Y}_\mu$ 变成杨表 $\mathcal{Y}_\mu(S)$, $Q_{\nu k}P_\mu(S)$ 把杨表 $\mathcal{Y}_\mu(S)$ 变成杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$, T_k 把杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$ 变成杨表 $\mathcal{Y}_\nu$, 而 $R_{1\nu}$ 又把杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 变回到杨表 $\mathcal{Y}_1$, 这就是说, 花括号里的置换是恒等变换. 这是合理的, 因为式 (6.111) 右面正比于幂等元 e_1. 最后

$$D_{\nu\mu}(S) = \sum_k \delta_k\delta(Q_{\nu k}) \tag{6.113}$$

即在这组标准基 $b_{\nu\mu}$ 中, 置换群不可约表示的矩阵元素都是整数, 置换群的不可约表示都是实表示.

现在, 计算置换群不可约表示的矩阵元素的问题, 归结为计算因子 $\delta_k\delta(Q_{\nu k})$. δ_k 是 y_ν 展开式的系数, 是已知的. $\delta(Q_{\nu k})$ 可按下法通过比较杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$ 和杨表 $\mathcal{Y}_\mu(S)$ 得到. 如果存在一对数, 它们在杨表 $\mathcal{Y}_\mu(S)$ 中填在同一行, 而在杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$ 中填在同一列, 则取 $\delta(Q_{\nu k})$ 为零. 如果填在杨表 $\mathcal{Y}_\mu(S)$ 中同一行的数, 在杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$ 中都不填在同一列, 则找杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$ 的纵向置换 $Q_{\nu k}^{-1}$, 它把杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$ 变成杨表 $\mathcal{Y}'$, 使杨表 $\mathcal{Y}'$ 和

杨表 $\mathcal{Y}_\mu(S)$ 每一对应行包含的填数都相同. $Q_{\nu k}$ 的置换字称就是 $\delta(Q_{\nu k})$. 具体计算可通过列表法进行.

如果要计算元素 S 在表示 $[\lambda]$ 中的表示矩阵, 先写出杨图 $[\lambda]$ 对应的正则杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 及其 y_ν, y_ν 是群元素 T_k 的组合, 如式 (6.110) 所示. 逐项计算 T_k^{-1} 对正则杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 的作用, 得到新杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$. 用新杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$ 代替式 (6.110) 中的 T_k, 得到的杨表组合式, 按 ν 增加的次序, 填在表中最左面一列. 这一列对计算任何群元素的表示矩阵都是一样的. 然后, 把要计算的元素 S 作用在正则杨表 $\mathcal{Y}_\mu$ 上, 得到新杨表 $\mathcal{Y}_\mu(S)$, 按 μ 增加的顺序列于表的最上面一行. 表的内容有 d 行和 d 列, 第 ν 行第 μ 列的数就是表示矩阵元 $D_{\nu\mu}(S)$, 它等于 $\sum_k \delta_k\delta(Q_{\nu k})$. 通过比较杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$ 和杨表 $\mathcal{Y}_\mu(S)$ 可以算得 $\delta(Q_{\nu k})$. 用 $\delta(Q_{\nu k})$ 代替最左面一列第 ν 行中的杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$, 得到的组合数就是 $D_{\nu\mu}(S)$, 填入表中第 ν 行第 μ 列的位置. 表中对角元之和就是特征标 $\chi^{[\lambda]}(S)$.

表 6.1 列表法计算置换群不可约表示的表示矩阵

$\sum_k \delta_k$ {杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$}	杨表 $\mathcal{Y}_\mu(S)$				
	2 3 4 5 1	2 3 5 4 1	2 3 1 4 5	2 4 5 3 1	2 4 1 3 5
1 2 3 4 5 − 1 4 5 2 3	$-1-0$	$0-1$	$1-0$	$0+1$	$0-0$
1 2 4 3 5	-1	0	0	0	1
1 2 5 3 4	0	-1	0	0	0
1 3 4 2 5	-1	0	0	1	0
1 3 5 2 4	0	-1	0	1	0

注: $[\lambda]=[3,2], S=(1\ 2\ 3\ 4\ 5), y_\nu=\sum_k \delta_k T_k$. T_k^{-1} 作用在杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 上得到杨表 $\mathcal{Y}_{\nu k}$, S 作用在杨表 $\mathcal{Y}_\mu$ 上得到杨表 $\mathcal{Y}_\mu(S)$.

表 6.1 以表示 [3, 2] 为例, 具体计算了轮换 $S=(1\ 2\ 3\ 4\ 5)$ 的表示矩阵, 从这例子中应该可以学会用列表法计算置换群不可约表示矩阵的一般方法. 由表中可知

$$D^{[3,2]}[(1\ 2\ 3\ 4\ 5)]=\begin{pmatrix} -1 & -1 & 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

同法可得

$$D^{[3,2]}[(1\ 2)]=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},\ D^{[3,2]}[(5\ 4\ 3\ 2\ 1)]=\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

由此很容易计算出每一个类中一个代表元素的表示矩阵

$$\begin{aligned} &(2\ 3) = (1\ 2\ 3\ 4\ 5)(1\ 2)(5\ 4\ 3\ 2\ 1), && (1\ 2\ 3) = (1\ 2)(2\ 3), \\ &(3\ 4) = (1\ 2\ 3\ 4\ 5)(2\ 3)(5\ 4\ 3\ 2\ 1), && (2\ 3\ 4\ 5) = (1\ 2)(1\ 2\ 3\ 4\ 5), \\ &(4\ 5) = (1\ 2\ 3\ 4\ 5)(3\ 4)(5\ 4\ 3\ 2\ 1), && (1\ 2)(3\ 4), \qquad (1\ 2\ 3)(4\ 5) \end{aligned}$$

并算出这表示的特征标表, 列于表 6.2.

表 6.2　置换群 [3,2] 表示的特征标表

类 (ℓ)	(1^5)	$(2,1^3)$	$(2^2,1)$	$(3,1^2)$	$(3,2)$	$(4,1)$	(5)
特征标	5	1	1	−1	1	−1	0

四、计算特征标的等效方法

列表法固然可以计算置换群不可约表示的特征标, 但这样计算特征标并不比计算表示矩阵简单. 有一种等效的方法, 只根据表示 $[\lambda]$ 和类 (ℓ) 这两个配分数, 就可以很方便地把特征标计算出来.

把描写类的非零配分数 ℓ_j 按任意次序排列并顺序编号, 把较小的 ℓ_j 排在前面会便于计算. 排定后, 用 ℓ_1 个 1, ℓ_2 个 2 等, 顺序按满足下面条件的所谓正则填充法填入杨图 $[\lambda]$:

(1) 每个数字填完后, 已填格子必须构成正则杨图.

(2) 填充同一数字的格子必须相连, 且由填该数的最左下方的格子开始, 沿向右或向上的方向, 可以不回头地一次走遍填以该数的全部格子. 这些格子所占行数减 1 的奇偶性称为该数字的填充宇称, 奇数为 −1, 偶数为 1.

如果能按正则填充法把全部数字都填入杨图, 称为一次正则填充. 在一次正则填充中, 每个数字的填充宇称的乘积称为该次正则填充的填充宇称, 最后把各次正则填充的填充宇称相加, 即得类 (ℓ) 在表示 $[\lambda]$ 中的特征标 $\chi^{[\lambda]}[(\ell)]$. 如果不能按正则填充法把全部数字都填入杨图, 则 $\chi^{[\lambda]}[(\ell)]=0$.

恒元单独构成类 (1^n), 它的正则填充就是把 n 个自然数按正则填充规则填入杨图, 因而特征标正是正则杨表的数目, 即表示的维数, 可用公式 (6.58) 计算. 在表

6.3 中用等效方法重新计算表 6.2 给出的特征标. 恒元的正则填充得到的表就是正则杨表, 在表 6.3 中不再列出.

表 6.3 用等效方法计算置换群[3,2]表示的特征标表

类	(1^5)	$(1^3,2)$	$(1,2^2)$	$(1^2,3)$	$(2,3)$	$(1,4)$	(5)
正则填充		1 2 3 4 4	1 2 2 3 3	1 3 3 2 3	1 2 2 1 2	1 2 2 2 2	
填充字称		1	1	−1	1	−1	
$\chi^{[3,2]}[(\ell)]$	5	1	1	−1	1	−1	0

如果把大的 ℓ_j 排在前面先填, 有时会增加正则填充的次数, 但最后填充字称相加后还是一样的. 例如, 前例中, 类 $(2,2,1)$, 把 $\ell_j=2$ 的数先填, 会有三次正则填充

$$\begin{array}{lccccccc} & \begin{matrix}1\,1\,3\\2\,2\end{matrix} & & \begin{matrix}1\,2\,2\\1\,3\end{matrix} & & \begin{matrix}1\,2\,3\\1\,2\end{matrix} & \\ \text{填充字称}= & 1 & + & (-1) & + & 1 & =1\end{array}$$

五、三个客体的置换群 S_3

S_3 群与正三角形对称群 D_3 同构. 下面作为例子, 用杨算符方法计算它的标准基和不等价不可约表示. S_3 群有六个元素, 三个类. (1^3) 类只包含恒元 E; $(2,1)$ 类包含三个元素, $A=(2\ 3)$, $B=(3\ 1)$ 和 $C=(1\ 2)$; (3) 类包含两个元素, $D=(3\ 2\ 1)$ 和 $F=(1\ 2\ 3)$. S_3 群有三种不同的杨图.

杨图 $[3]$ 只有一个正则杨表, 因而对应一维表示, 它就是恒等表示. 标准基为

$$\boxed{1\,|\,2\,|\,3}\qquad b^{[3]}=e^{[3]}=\{E+(1\ 2)+(2\ 3)+(3\ 1)+(1\ 2\ 3)+(3\ 2\ 1)\}/6$$

杨图 $[2,1]$ 有两个正则杨表, 对应二维表示. 幂等元和标准基为

$$\begin{matrix}1 & 2\\ 3\end{matrix}\qquad b_{11}^{[2,1]}=e_1^{[2,1]}=\{E+(1\ 2)-(1\ 3)-(2\ 1\ 3)\}/3$$

$$\begin{matrix}1 & 3\\ 2\end{matrix}\qquad b_{22}^{[2,1]}=e_2^{[2,1]}=\{E+(1\ 3)-(1\ 2)-(3\ 1\ 2)\}/3$$

$$b_{21}^{[2,1]}=(2\ 3)e_1^{[2,1]}=\{(2\ 3)+(3\ 2\ 1)-(2\ 3\ 1)-(2\ 1)\}/3$$
$$b_{12}^{[2,1]}=(2\ 3)e_2^{[2,1]}=\{(2\ 3)+(2\ 3\ 1)-(3\ 2\ 1)-(3\ 1)\}/3$$

用列表法可以算出生成元 $(1\ 2)$ 和 $(1\ 2\ 3)$ 的表示矩阵 (见表 6.4)

$$D^{[2,1]}[(1\ 2)]=\begin{pmatrix}1 & -1\\ 0 & -1\end{pmatrix},\qquad D^{[2,1]}[(1\ 2\ 3)]=\begin{pmatrix}-1 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}\tag{6.114}$$

这表示不是实正交表示, 因为标准基作为群代数的矢量是不正交的. 通过相似变换 X 可以化成式 (2.10) 给出的实正交表示形式, 用这 X 矩阵组合标准基, 得到群空间正交归一的矢量

$$X = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 3 & -\sqrt{3} \\ 3 & \sqrt{3} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
\phi_1 &= (3/2)\,(b_{11} + b_{21}) = \{E + (2\ 3) - (3\ 1) - (1\ 2\ 3)\}/2, \\
\phi_2 &= (\sqrt{3}/2)\,(-b_{11} + b_{21}) \\
&= \{-E + (2\ 3) + (3\ 1) - 2(1\ 2) - (1\ 2\ 3) + 2(3\ 2\ 1)\}/(2\sqrt{3})
\end{aligned}$$

表 6.4　S_3 群若干元素在不可约表示 [2,1] 中的表示矩阵

$\mathcal{Y}_\nu$	$S = (1\ 2)$		$S = (2\ 3)$		$S' = (1\ 2\ 3)$	
	2 1 3	2 3 1	1 3 2	1 2 3	2 3 1	2 1 3
1 2 3	1	−1	0	1	−1	1
1 3 2	0	−1	1	0	−1	0

杨图 $[1,1,1]$ 也只有一个正则杨表, 对应的一维表示是反对称表示, 元素的表示矩阵等于该元素的置换字称. 标准基为

$$\begin{array}{|c|}\hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline\end{array} \qquad \begin{aligned} b^{[1,1,1]} &= e^{[1,1,1]} \\ &= \{E - (1\ 2) - (2\ 3) - (3\ 1) + (1\ 2\ 3) + (3\ 2\ 1)\}/6 \end{aligned}$$

六、置换群不可约表示的直乘分解

置换群不可约表示直乘分解的克莱布施 – 戈登级数没有特殊的规则, 就按特征标分解的方法计算. 但因置换群所有不可约表示都是实表示, 特征标是实数, 这使参加直乘的表示 $[\lambda]$ 和 $[\mu]$ 与约化后的表示 $[\nu]$ 在特征标分解的公式中处于平等的地位

$$\begin{aligned}
\chi^{[\lambda]}(R)\chi^{[\mu]}(R) &= \sum_{\nu} a_{\lambda\mu\nu}\chi^{[\nu]}(R), \\
a_{\lambda\mu\nu} &= \frac{1}{n!}\sum_{R\in S_n} \chi^{[\lambda]}(R)\chi^{[\mu]}(R)\chi^{[\nu]}(R)
\end{aligned} \tag{6.115}$$

$a_{\lambda\mu\nu}$ 对于三个指标完全对称. 这性质可以部分简化置换群克莱布施 – 戈登级数的计算, 部分计算结果可参看有关书籍, 如文献 [64] 第六章第 31 题.

一行的杨图 $[n]$ 只有一种正则杨表, 对应杨算符是所有群元素相加, 因而对应恒等表示, 所有群元素都对应数 1. 一列的杨图 $[1^n]$ 也只有一种正则杨表, 对应杨算

符是所有群元素乘其置换宇称后相加, 因而对应反对称表示, 群元素的表示矩阵等于元素的置换宇称. 把杨图 $[\lambda]$ 取转置, 即以杨图对角线做反射, 得到的杨图 $[\tilde{\lambda}]$, 与杨图 $[\lambda]$ 互称关联 (associate) 杨图. 根据计算置换群不可约表示特征标的等效方法可以知道, 互为关联杨图的两表示维数相等, 每个类在这两表示中的特征标只相差类中元素的置换宇称. 事实上, 杨图 $[\lambda]$ 的任一正则填充, 取转置后正是关联杨图 $[\tilde{\lambda}]$ 的正则填充. 在这一对正则填充中, 每一个数的填充位置只是行列交换. 设类中元素包含一个长度为 ℓ_j 的轮换, 在正则填充中有 ℓ_j 个相同的数填入杨图. 根据正则填充的规则, 这些数所占行数和列数之和等于 ℓ_j+1, 它的偶奇性就是长度为 ℓ_j 轮换的偶奇性. 因此这些数在这一对正则填充中所产生的填充宇称也就相差该轮换的置换宇称. 由此可知, 杨图 $[\lambda]$ 的表示与反对称表示 $[1^n]$ 的直乘等价于关联杨图 $[\tilde{\lambda}]$ 的表示

$$[\tilde{\lambda}] \simeq [1^n] \times [\lambda] \tag{6.116}$$

这里为书写清楚起见, 直接用杨图代替不可约表示. 结合 $a_{\lambda\mu\nu}$ 的对称性质, 可得关于置换群不可约表示直乘分解的若干一般规则

$$\begin{aligned}
&[\lambda] = [n] \times [\lambda]\ , \qquad [\tilde{\lambda}] \times [\mu] \simeq [\lambda] \times [\tilde{\mu}], \\
&[\lambda] \times [\mu] \simeq [\tilde{\lambda}] \times [\tilde{\mu}] \simeq [\mu] \times [\lambda]
\end{aligned}$$

在 $[\lambda] \times [\mu]$ 的分解中出现恒等表示的充要条件是 $[\lambda] \simeq [\mu]$, 出现反对称表示的充要条件是 $[\lambda] \simeq [\tilde{\mu}]$, 而且在此条件下, 恒等表示或反对称表示只出现一次. 利用这些规则, S_3 群不可约表示直乘分解的克莱布施 - 戈登级数为

$$\begin{aligned}
&[3] \times [3] \simeq [1^3] \times [1^3] \simeq [3], \qquad [3] \times [1^3] \simeq [1^3], \\
&[3] \times [2,1] \simeq [1^3] \times [2,1] \simeq [2,1], \\
&[2,1] \times [2,1] \simeq [3] \oplus [1^3] \oplus [2,1]
\end{aligned} \tag{6.117}$$

6.5 不可约表示的实正交形式

用列表法计算的置换群不可约表示矩阵不是实正交的. 但因它与杨算符密切联系在一起, 在某些问题中, 例如在张量表示约化问题中, 这种形式有它的方便之处. 但是在另一些问题中, 人们还是喜欢实正交表示. 这一节我们对于置换群的任意不可约表示 $[\lambda]$, 讨论它的实正交形式及其正交基. 为简化符号, 讨论中省略指标 $[\lambda]$.

首先, 研究置换群群代数中一组完备的对易算符集. 定义

$$\begin{gathered}
M_a = \sum_{d=1}^{a-1} (a\ d) = \sum_{d=1}^{a-1} P_{a-1}P_{a-2}\cdots P_{d+1}P_dP_{d+1}\cdots P_{a-2}P_{a-1}, \\
2 \leqslant a \leqslant n\ , \qquad M_1 = 0
\end{gathered} \tag{6.118}$$

其中, $P_a = (a \;\; a+1)$ 是相邻客体的对换. 由定义知

$$M_{a+1} = P_a + P_a M_a P_a \ , \qquad P_a M_{a+1} = E + M_a P_a \tag{6.119}$$

根据式 (6.18), 得

$$P_a M_b = M_b P_a \ , \qquad \text{若} \ \ b \neq a \ \ \text{或} \ \ a+1 \tag{6.120}$$

因此

$$[M_a, \ M_b] = 0 \tag{6.121}$$

现在我们来证明, 这组互相对易的算符 M_a, 在标准基 $b_{\nu\rho}$ 中的矩阵形式为上三角形矩阵, 即对角线左下方的矩阵元素都为零. 具体说, 在标准基 $b_{\nu\rho}$ 中, 对确定的 ρ, 要证

$$\begin{aligned} & M_a b_{\nu\rho} = \sum_{\mu} b_{\mu\rho} D_{\mu\nu}(M_a), \\ & D_{\mu\nu}(M_a) = 0 \ , \qquad \text{当} \ \ \mu > \nu, \\ & D_{\nu\nu}(M_a) = m_\nu(a) \equiv c_\nu(a) - r_\nu(a) \end{aligned} \tag{6.122}$$

其中, 矩阵的行列指标是按正则杨表自小至大排列, $r_\nu(a)$ 和 $c_\nu(a)$ 是数 a 在正则杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 中所填位置的行数和列数. 这列数与行数之差 $m_\nu(a)$, 在数学上称为杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 中 a 所填格子的容度 (content). 在杨表对角线上的格子容度为零, 对角线的平行线上的格子容度相等. 由任何格子出发, 每向上或向右走一格, 容度增加 1, 向下或向左走一格, 容度减少 1.

证明　重新改写式 (6.118). 在正则杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 中, 把填在第 $r_\nu(a)$ 行 a 左面格子的数字记作 a_i, 把填在前 $r_\nu(a)-1$ 行的数字, 小于 a 的记作 b_j, 大于 a 的记作 d_k, 把填在 a 左下方, 小于 a 的数字记作 t_ℓ, 则

$$\begin{aligned} & M_a = M_a^{(1)} + M_a^{(2)} + M_a^{(3)} + M_a^{(4)}, \\ & M_a^{(1)} = \sum_i \ (a \;\; a_i) \ , \qquad M_a^{(2)} = \sum_j \ (a \;\; b_j) + \sum_k \ (a \;\; d_k) \ , \\ & M_a^{(3)} = -\sum_k \ (a \;\; d_k) \ , \qquad M_a^{(4)} = \sum_\ell \ (a \;\; t_\ell) \end{aligned}$$

由杨算符的对称性质式 (6.66) 和福克条件式 (6.68) 知

$$M_a^{(1)} b_{\nu\rho} = \{c_\nu(a) - 1\} \, b_{\nu\rho} \ , \qquad M_a^{(2)} b_{\nu\rho} = \{1 - r_\nu(a)\} \, b_{\nu\rho} \tag{6.123}$$

把 $M_a^{(3)}$ 和 $M_a^{(4)}$ 的每一项作用到杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 上, 都是把一个较小的数与右上方一个较大的数交换. 虽然交换后的杨表一般不是正则杨表, 但用证明定理四推论二类似的方法, 同样可以证明

$$\mathcal{Y}_\mu M_a^{(3)} \mathcal{Y}_\nu = \mathcal{Y}_\mu M_a^{(4)} \mathcal{Y}_\nu = 0 \ , \qquad \text{当} \ \ \mu \geqslant \nu \tag{6.124}$$

由式 (6.102) 得

$$\begin{aligned}&\mathcal{Y}_\mu y_\mu M_a^{(3)}\mathcal{Y}_\nu = \mathcal{Y}_\mu y_\mu M_a^{(4)}\mathcal{Y}_\nu = 0\ ,\\ &b_{\rho\mu}M_a^{(3)}b_{\nu\rho} = b_{\rho\mu}M_a^{(4)}b_{\nu\rho} = 0\ ,\end{aligned}\qquad \text{当}\ \ \mu \geqslant \nu$$

证完.

有限群的实表示等价于实正交表示, 在实正交表示中对换 P_a 的表示矩阵又是实对称矩阵, 因而 M_a 的表示矩阵也是实对称矩阵, 存在实正交相似变换能把所有 M_a 的表示矩阵同时化成对角矩阵. 这就是说, 对给定的表示 $D^{[\lambda]}$, 可以找到实相似变换 X, 使 M_a 的表示矩阵同时对角化, 而 P_a 的表示矩阵都是实正交兼对称矩阵

$$\overline{D}_{\nu\mu}(M_a) = \left[X^{-1}D(M_a)X\right]_{\nu\mu} = \delta_{\nu\mu}m_\nu(a), \qquad \overline{D}(P_a) = X^{-1}D(P_a)X = \overline{D}(P_a)^T \tag{6.125}$$

因为 $D(M_a)$ 是上三角矩阵和 $\overline{D}(M_a)$ 是对角矩阵, 所以相似变换矩阵 X 也是上三角矩阵.

取对应杨图 $[\lambda]$ 的任一左理想 $\mathcal{L}_\rho$, 基为 $b_{\mu\rho}$. 做实线性组合 $X_{\mu\nu}$, 得新基 ϕ_ν

$$\phi_\nu = \sum_{\mu=1}^{d} b_{\mu\rho}X_{\mu\nu}\ , \qquad R\phi_\nu = \sum_{\mu}\ \phi_\mu\overline{D}_{\mu\nu}(R) \tag{6.126}$$

其中, 基 ϕ_ν 的指标 ν 仍是正则杨表的序指标, 指标 ρ 被省略了. ϕ_ν 是算符集 M_a 的共同本征状态, 本征值为容度 $m_\nu(a)$. 不可能有两个不同的正则杨表, 所有数 a 在它们中的容度都相同, 因而 M_a 的共同本征状态是不简并的, 算符集 M_a 是置换群群代数中一组完备的对易算符集. 如果希望在整个群代数中找一组完备基 $\Phi_{\nu\mu}$, 在左乘和右乘群元素 R 时都按这实正交表示 $\overline{D}(R)$ 变化

$$R\Phi_{\nu\mu} = \sum_{\rho}\ \Phi_{\rho\mu}\overline{D}_{\rho\nu}(R), \qquad \Phi_{\nu\mu}R = \sum_{\rho}\ \overline{D}_{\mu\rho}(R)\Phi_{\nu\rho} \tag{6.127}$$

则

$$\Phi_{\nu\mu} = \sum_{\rho\tau}\ \left(X^{-1}\right)_{\mu\tau} b_{\rho\tau}X_{\rho\nu} \tag{6.128}$$

基 ϕ_ν 和 $\Phi_{\nu\mu}$ 都称为群代数中的正交基.

现在我们更关心的是找出实正交表示 $\overline{D}(P_a)$ 的具体形式和计算相似变换矩阵 X. 设在正则杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 中, a 和 $a+1$ 既不填在同一行, 也不填在同一列, 则在交换 a 和 $a+1$ 的填充位置后, 杨表仍是正则的, 记作 $\mathcal{Y}_{\nu_a}$

$$\begin{gathered}m_\nu(a) = m_{\nu_a}(a+1)\ , \qquad m_\nu(a+1) = m_{\nu_a}(a),\\ |m_\nu(a) - m_\nu(a+1)| > 1\end{gathered} \tag{6.129}$$

ν 和 ν_a 的关系是相互的. 若在正则杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 中, a 和 $a+1$ 填在同一行或同一列, 则在交换 a 和 $a+1$ 的填充位置后, 杨表不再是正则的. 对这样的正则杨表 $\mathcal{Y}_\nu$, 我们称 ν_a 不存在. 把表示矩阵代入式 (6.120), 得

$$\overline{D}_{\mu\nu}(P_a)\{m_\mu(b)-m_\nu(b)\}=0, \qquad \text{当}\ b\neq a\ \text{或}\ a+1$$

即

$$\overline{D}_{\mu\nu}(P_a)=0\ , \qquad \text{当}\ \mu\ \neq\ \nu\ \text{或}\ \nu_a \tag{6.130}$$

因此 $\overline{D}(P_a)$ 是方块矩阵, 它分解为若干个一维和二维子矩阵的直和. 当 ν_a 不存在时得 $\overline{D}(P_a)$ 的一维子矩阵 $\overline{D}_{\nu\nu}(P_a)$, 而当 ν_a 存在时得 $\overline{D}(P_a)$ 的二维子矩阵. 不失普遍性, 设 $\nu<\nu_a$, 则二维子矩阵表为

$$\begin{pmatrix} \overline{D}_{\nu\nu}(P_a) & \overline{D}_{\nu\nu_a}(P_a) \\ \overline{D}_{\nu_a\nu}(P_a) & \overline{D}_{\nu_a\nu_a}(P_a) \end{pmatrix}$$

把式 (6.125) 和 (6.129) 代入式 (6.119) 得

$$-\overline{D}_{\nu\nu}(P_a)=\overline{D}_{\nu_a\nu_a}(P_a)=m^{-1}\ , \qquad m\equiv m_\nu(a)-m_\nu(a+1)$$

由正交性得

$$\overline{D}_{\nu\nu_a}(P_a)=\overline{D}_{\nu_a\nu}(P_a)=\frac{\left\{m^2-1\right\}^{1/2}}{m}$$

开方时有正负两种可能, 选取正交基的相因子使上式取正号. 这样, 二维子矩阵表为

$$\frac{1}{m}\begin{pmatrix} -1 & (m^2-1)^{1/2} \\ (m^2-1)^{1/2} & 1 \end{pmatrix}, \qquad m\ \equiv\ m_\nu(a)-m_\nu(a+1)\ >\ 1 \tag{6.131}$$

其中, 行 (列) 指标为 ν 和 ν_a. m 是在正则杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 中, 填 a 的格子向左和向下到达填 $a+1$ 的格子需走的步数. 在 ν_a 不存在时, 同样可由式 (6.119) 得

$$\overline{D}_{\nu\nu}(P_a)=\begin{cases} 1, & a\ \text{和}\ a+1\ \text{填在同一行} \\ -1, & a\ \text{和}\ a+1\ \text{填在同一列} \end{cases} \tag{6.132}$$

式 (6.131) 和 (6.132) 就是置换群不可约表示 $[\lambda]$ 的实正交形式.

下面以 S_5 群的 $[3,2]$ 表示为例, 说明在正交基中置换群不可约表示矩阵的计算方法, 并计算正交基与标准基间的相似变换矩阵. 对杨图 $[3,2]$, 正则杨表自 $\mathcal{Y}_1$ 至 $\mathcal{Y}_5$ 排列如下

1 2 3	1 2 4	1 2 5	1 3 4	1 3 5
4 5	3 5	3 4	2 5	2 4

例如, 计算 $\overline{D}(P_2)$, 需观察 2 和 3 在正则杨表中所填位置. 把正则杨表 $\mathcal{Y}_2$ 中填 2 和 3 的格子交换, 得正则杨表 $\mathcal{Y}_4$, 从填 2 的格子走到填 3 的格子需走两步, 即 $m = 2$. 同样, 正则杨表 $\mathcal{Y}_3$ 和 $\mathcal{Y}_5$ 中, 填 2 和 3 的格子互相交换, $m = 2$. 按此法计算得表示矩阵

$$\overline{D}(P_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad \overline{D}(P_2) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\overline{D}(P_3) = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} -1 & \sqrt{8} & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{8} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}, \qquad \overline{D}(P_4) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 1 \end{pmatrix}$$

其次, 我们来找标准基到正交基的相似变换矩阵 X, 它是上三角形矩阵. 把 X 的五个列矩阵分别记作 X_μ, 设

$$X_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad X_2 = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad X_3 = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad X_4 = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad X_5 = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ d_4 \\ d_5 \end{pmatrix}$$

因为 $\overline{D}(M_a)$ 是对角矩阵, 不足以确定相似变换矩阵. 现用 P_a 的表示矩阵来找两等价表示间的相似变换关系. 用列表法计算 P_a 在标准基中的表示矩阵 $D(P_a)$, 计算方法已在 6.5 节中给出, 结果是

$$D(P_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad D(P_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$D(P_3) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad D(P_4) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$D(P_a)X = X\overline{D}(P_a) \tag{6.133}$$

下面计算中只写出矩阵等式中不全为零的那些行. 由

$$D(P_3)X_1 = -\frac{1}{3}X_1 + \frac{\sqrt{8}}{3}X_2\,, \qquad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{\sqrt{8}}{3}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

定出 $a_1 = 1/\sqrt{8}$ 和 $a_2 = 3/\sqrt{8}$. 由

$$D(P_4)X_2 = -\frac{1}{2}X_2 + \frac{\sqrt{3}}{2}X_3\,, \qquad \frac{1}{\sqrt{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2\sqrt{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{\sqrt{3}}{2}\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}$$

定出 $b_1 = b_2 = \sqrt{3/8}$ 和 $b_3 = \sqrt{3/2}$. 由

$$D(P_2)X_2 = -\frac{1}{2}X_2 + \frac{\sqrt{3}}{2}X_4\,, \qquad \frac{1}{\sqrt{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2\sqrt{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{\sqrt{3}}{2}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix}$$

定出 $c_1 = c_2 = \sqrt{3/8}$, $c_3 = 0$ 和 $c_4 = \sqrt{3/2}$. 由

$$D(P_4)X_4 = -\frac{1}{2}X_4 + \frac{\sqrt{3}}{2}X_5\,, \qquad \sqrt{\frac{3}{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{\sqrt{3}}{2}\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ d_4 \\ d_5 \end{pmatrix}$$

定出 $d_1 = 3/\sqrt{8}$, $d_2 = 1/\sqrt{8}$, $d_3 = d_4 = 1/\sqrt{2}$ 和 $d_5 = \sqrt{2}$. 最后通乘 $\sqrt{8}$ 以消去分母, 得相似变换矩阵 X 为

$$X = \begin{pmatrix} \sqrt{8} & 1 & \sqrt{3} & \sqrt{3} & 3 \\ 0 & 3 & \sqrt{3} & \sqrt{3} & 1 \\ 0 & 0 & 2\sqrt{3} & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{3} & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}$$

解出来的 X 矩阵应该进行验算, 是否满足式 (6.133), 也可验算等式 $D(M_a)X = X\overline{D}(M_a)$.

6.6 置换群不可约表示的外积

置换群不可约表示的直乘通常称为内积, 因为置换群不可约表示还有另外一种称为外积的运算, 它涉及子群 $\mathrm{S}_n\otimes\mathrm{S}_m$ 不可约表示关于群 S_{n+m} 的诱导表示. 本节用杨算符方法来讨论置换群表示外积的概念和约化方法.

一、S_{n+m} 群和 $\mathrm{S}_n\otimes\mathrm{S}_m$ 群的表示

为了说清问题, 先规定一些符号. $n+m$ 个客体置换群 S_{n+m} 的群代数记作 $\mathcal{L}$, 它是 $(n+m)!$ 维的. $\mathcal{L}$ 中的原始幂等元记作 $e^{[\omega]}$, 它生成的左理想是 $\mathcal{L}^{[\omega]}=\mathcal{L}e^{[\omega]}$, 对应的不可约表示 $[\omega]$ 是 $d_{[\omega]}$ 维的. 杨图 $[\omega]$ 是 $n+m$ 格的.

在 $n+m$ 个客体中, 前 n 个客体置换群记作 S_n, 后 m 个客体置换群记作 S_m. 这两个置换群涉及的客体不同, 因而分属两个子群的元素乘积可以对易, 两子群的公共元素只有恒元. 两子群的直乘 $\mathrm{S}_n\otimes\mathrm{S}_m$ 是 S_{n+m} 群的一个子群. 子群的群代数记作 $\mathcal{L}^{nm}$, 它是 $n!m!$ 维的, 子群的指数等于 $n+m$ 个客体中选 n 个客体的组合数

$$N=\begin{pmatrix} n+m \\ n \end{pmatrix}=\frac{(n+m)!}{n!m!} \tag{6.134}$$

子群的陪集表为

$$T_\alpha\left(\mathrm{S}_n\otimes\mathrm{S}_m\right)\ ,\qquad \alpha\neq 1$$

其中, N 个置换 $T_\alpha\in\mathrm{S}_{n+m}$, 把前 n 个客体移到 $n+m$ 个位置中的 n 个新位置, 不同的置换 T_α 得到的这 n 个新位置不同. 对每一组新位置, 这种置换 T_α 当然不是唯一的, 但可任意地把它们选定. 取 $T_1=E$, 则群代数 $\mathcal{L}$ 可分解为子群及其陪集对应子空间的直和

$$\mathcal{L}=\bigoplus_{\alpha=1}^{N} T_\alpha\mathcal{L}^{nm}\ ,\qquad T_1=E \tag{6.135}$$

子群 $\mathrm{S}_n\otimes\mathrm{S}_m$ 的原始幂等元记作 $e^{[\lambda][\mu]}$, 由它生成的最小左理想记作 $\mathcal{L}^{[\lambda][\mu]}=\mathcal{L}^{nm}e^{[\lambda][\mu]}$, 对应的不可约表示 $[\lambda]\times[\mu]$ 维数是 $d_{[\lambda]}d_{[\mu]}$, 杨图 $[\lambda]$ 和 $[\mu]$ 分别是 n 和 m 格的. 对 S_{n+m} 群来说, $e^{[\lambda][\mu]}$ 是幂等元, 但不是原始幂等元, $\mathcal{L}^{[\lambda][\mu]}$ 是子代数, 但不是左理想.

现在讨论两个有联系的表示约化问题. 第一个问题是, S_{n+m} 群的不可约表示 $[\omega]$, 作为子群 $\mathrm{S}_n\otimes\mathrm{S}_m$ 的分导表示, 一般是可约的, 它可以约化为子群 $\mathrm{S}_n\otimes\mathrm{S}_m$ 不可

约表示 $[\lambda]\times[\mu]$ 的直和

$$[\omega] \simeq \bigoplus a^{\omega}_{\lambda\mu} \ \{[\lambda]\times[\mu]\} \ , \qquad d_{[\omega]} = \sum a^{\omega}_{\lambda\mu} \ d_{[\lambda]}d_{[\mu]} \tag{6.136}$$

$a^{\omega}_{\lambda\mu}$ 是不可约表示 $[\lambda]\times[\mu]$ 在分导表示 $[\omega]$ 约化中的重数, 它可根据子群元素的特征标来计算

$$a^{\omega}_{\lambda\mu} = \frac{1}{n!m!} \sum_{P\in \mathrm{S}_n\otimes \mathrm{S}_m} \chi^{[\lambda][\mu]}(P)\chi^{[\omega]}(P) \tag{6.137}$$

其中, $\chi^{[\lambda][\mu]}(P)$ 和 $\chi^{[\omega]}(P)$ 分别是子群元素 P 在表示 $[\lambda]\times[\mu]$ 和 $[\omega]$ 中的特征标.

从群代数的观点看, 设 t_j 是 $\mathcal{L}$ 的一个矢量, 使

$$e^{[\lambda][\mu]}t_j e^{[\omega]} \neq 0 \tag{6.138}$$

它是一个映射算符, 把子群 $\mathrm{S}_n\otimes\mathrm{S}_m$ 的一个最小左理想投影到 S_{n+m} 群的左理想 $\mathcal{L}^{[\omega]}$ 中去. 也就是说, 把子群 $\mathrm{S}_n\otimes\mathrm{S}_m$ 的群代数 $\mathcal{L}^{nm}$ 左乘到式 (6.138) 上, 得到子群 $\mathrm{S}_n\otimes\mathrm{S}_m$ 的一个最小左理想, 对应子群不可约表示 $[\lambda]\times[\mu]$, 这左理想又属于 S_{n+m} 群的左理想 $\mathcal{L}^{[\omega]}$

$$\mathcal{L}^{nm}e^{[\lambda][\mu]}t_j e^{[\omega]} \subset \mathcal{L}^{[\omega]} \tag{6.139}$$

这说明, S_{n+m} 群的不可约表示 $[\omega]$, 作为子群 $\mathrm{S}_n\otimes\mathrm{S}_m$ 的分导表示, 在约化中包含子群不可约表示 $[\lambda]\times[\mu]$. 式 (6.137) 指出, 这样的不可约表示 $[\lambda]\times[\mu]$ 在分导表示 $[\omega]$ 中的重数为 $a^{\omega}_{\lambda\mu}$, 因而满足式 (6.138) 的线性无关的映射算符共有 $a^{\omega}_{\lambda\mu}$ 个, 式 (6.138) 中的 j 可取 $1\leqslant j\leqslant a^{\omega}_{\lambda\mu}$.

这 $a^{\omega}_{\lambda\mu}$ 个映射算符也给出了分导表示 $[\omega]$ 按子群不可约表示 $[\lambda]\times[\mu]$ 约化的相似变换矩阵. 实际计算中, 可逐个取最小左理想 $\mathcal{L}^{[\omega]}$ 中的标准基, 检验式 (6.138) 是否为零, 把不为零的取出来, 选取线性无关的作为映射算符. 计算相似变换时, 把子群不可约表示 $[\lambda]\times[\mu]$ 的标准基左乘到映射算符上, 得到的矢量按 $\mathcal{L}^{[\omega]}$ 的标准基分解, 就是相似变换矩阵的列矩阵 (见附录 19).

因为由同一原始幂等元生成的最小左理想和最小右理想, 它们对应的表示是等价的, 所以右理想线性无关的映射算符也有 $a^{\omega}_{\lambda\mu}$ 个

$$e^{[\omega]}t'_j e^{[\lambda][\mu]} \neq 0 \ , \qquad 1\leqslant j\leqslant a^{\omega}_{\lambda\mu} \tag{6.140}$$

现在讨论第二个问题. $e^{[\lambda][\mu]}$ 是子群 $\mathrm{S}_n\otimes\mathrm{S}_m$ 的原始幂等元, 同时也是 S_{n+m} 群的幂等元, 虽然不是原始的. 把 S_{n+m} 群的群代数 $\mathcal{L}$ 左乘到此幂等元上得到 S_{n+m} 群的一个左理想, 记作 $\mathcal{L}_{\lambda\mu}$

$$\mathcal{L}_{\lambda\mu} = \mathcal{L}e^{[\lambda][\mu]} \tag{6.141}$$

这左理想对应 S_{n+m} 群的表示, 就是子群表示 $[\lambda]\times[\mu]$ 关于群 S_{n+m} 的诱导表示, 称为子群 S_n 不可约表示 $[\lambda]$ 和子群 S_m 不可约表示 $[\mu]$ 的外积, 记作 $[\lambda]\otimes[\mu]$. 它一般是 S_{n+m} 群的可约表示, 可按 S_{n+m} 群不可约表示 $[\omega]$ 分解.

用群代数的观点讨论这表示的维数. 把式 (6.135) 代入式 (6.141), 得

$$\mathcal{L}_{\lambda\mu}=\bigoplus_{\alpha=1}^{N} T_\alpha \mathcal{L}^{nm} e^{[\lambda][\mu]}\ , \qquad T_1=E \tag{6.142}$$

求和的每一项 $T_\alpha \mathcal{L}^{nm} e^{[\lambda][\mu]}$ 都是 $d_{[\lambda]}d_{[\mu]}$ 维的, 而且它们没有公共矢量, 因而外积表示 $[\lambda]\otimes[\mu]$ 的维数为

$$d_{[\lambda]\otimes[\mu]}=\frac{(n+m)!}{n!m!}d_{[\lambda]}d_{[\mu]} \tag{6.143}$$

现在映射算符式 (6.140) 把 S_{n+m} 群的最小左理想 $\mathcal{L}^{[\omega]}$ 映射到左理想 $\mathcal{L}_{\lambda\mu}$ 中

$$\mathcal{L}e^{[\omega]}t'_j e^{[\lambda][\mu]}\subset\mathcal{L}_{\lambda\mu} \tag{6.144}$$

可见, 外积表示 $[\lambda]\otimes[\mu]$ 按 S_{n+m} 群不可约表示约化中, 表示 $[\omega]$ 的重数刚好也是 $a^{\omega}_{\lambda\mu}$

$$[\lambda]\otimes[\mu]\simeq\bigoplus\ a^{\omega}_{\lambda\mu}[\omega]\ , \qquad \frac{(n+m)!}{n!m!}d_{[\lambda]}d_{[\mu]}=\sum\ a^{\omega}_{\lambda\mu}\ d_{[\omega]} \tag{6.145}$$

这实际是费罗宾尼斯定理的一个例子 [见式 (3.65)]. 用特征标的语言来说, 组合系数 $a^{\omega}_{\lambda\mu}$ 又等于

$$a^{\omega}_{\lambda\mu}=\frac{1}{(n+m)!}\sum_{R\in S_{n+m}}\ \chi^{[\lambda]\otimes[\mu]}(R)\chi^{[\omega]}(R) \tag{6.146}$$

其中, $\chi^{[\lambda]\otimes[\mu]}(R)$ 是 S_{n+m} 群的元素 R 在外积表示 $[\lambda]\otimes[\mu]$ 中的特征标. 证明见第三章. 式 (6.144) 也给出了诱导表示 $[\lambda]\otimes[\mu]$ 按 $[\omega]$ 约化的相似变换矩阵. 实际计算中, 先把陪集元素 T_α 左乘到子群不可约表示 $[\lambda]\times[\mu]$ 的标准基上, 得到外积表示的完备基, 然后把不可约表示 $[\omega]$ 的标准基代替式 (6.144) 中的 $\mathcal{L}$, 左乘到映射算符上, 得到的矢量按外积表示的完备基分解, 就是相似变换矩阵的列矩阵 (见附录 19).

二、立特武德–理查森规则

虽然特征标方法可以计算重数 $a^{\omega}_{\lambda\mu}$, 但立特武德 (Littlewood)– 理查森 (Richardson) 提出一种图形规则, 可更方便地利用杨图计算不可约表示外积的约化. 这种规则称为立特武德 – 理查森规则. 计算方法如下.

对表示 $[\lambda]\otimes[\mu]$, 任取其中一个杨图, 通常取格数较多的杨图, 例如 $[\lambda]$, 作为基础, 将另一个杨图 $[\mu]$ 的各行格子分别填以行数, 即第 j 行的格子填以数 j. 然后, 自第一行开始, 自上而下逐行把杨图 $[\mu]$ 的格子补到杨图 $[\lambda]$ 上, 每补完一行格子, 都要求满足如下条件:

(1) 每行补完后的图是正则杨图;

(2) 填相同数的格子不补在同一列;

(3) 自第一行开始, 逐行地自右向左读杨图中补上的格子, 在读的过程的每一步, 始终保持填数大的格子数目不大于填数小的格子数目.

这样补得的全部可能的杨图 $[\omega]$, 就是在表示外积 $[\lambda]\otimes[\mu]$ 中出现的 S_{n+m} 群不可约表示. 如果在满足上述规则的条件下, 几次得到同一个杨图 $[\omega]$, 则说明该表示在约化中出现几次.

利用立特武德 - 理查森规则不仅可以计算置换群两不可约表示外积的约化, 还可以计算 S_{n+m} 群的不可约表示 $[\omega]$ 关于子群 $\mathrm{S}_n\otimes\mathrm{S}_m$ 分导表示的约化. 下面两个例子说明具体计算方法. 再利用式 (6.139) 和 (6.144) 还可以进一步计算这两种约化的相似变换矩阵, 如附录 19 所示.

例 1　计算表示 $[2,1]\otimes[2,1]$ 的约化.

$$\begin{array}{ll}\times & \times \\ \times & \end{array}\otimes\begin{array}{ll}1 & 1 \\ 2 & \end{array}$$

将第二个杨图的第一行格子填 1, 第二行格子填 2. 先将第一行的格子按上述规则补入第一个杨图

$$\begin{array}{llll}\times & \times & 1 & 1 \\ \times & & & \end{array}\qquad \begin{array}{lll}\times & \times & 1 \\ \times & 1 & \end{array}\qquad \begin{array}{lll}\times & \times & 1 \\ \times & & \\ 1 & & \end{array}\qquad \begin{array}{ll}\times & \times \\ \times & 1 \\ 1 & \end{array}$$

再将填 2 的格子补上. 按照第三条规则, 这格子不能补在第一行, 对第四个图, 它也不能补在第二行. 允许的图有

$$\begin{array}{ll}\times & \times \\ \times & \end{array}\otimes\begin{array}{ll}1 & 1 \\ 2 & \end{array}\simeq\begin{array}{llll}\times & \times & 1 & 1 \\ \times & 2 & & \end{array}\oplus\begin{array}{llll}\times & \times & 1 & 1 \\ \times & & & \\ 2 & & & \end{array}\oplus\begin{array}{lll}\times & \times & 1 \\ \times & 1 & 2 \end{array}$$

$$\oplus\begin{array}{lll}\times & \times & 1 \\ \times & 1 & \\ 2 & & \end{array}\oplus\begin{array}{lll}\times & \times & 1 \\ \times & 2 & \\ 1 & & \end{array}\oplus\begin{array}{lll}\times & \times & 1 \\ \times & & \\ 1 & & \\ 2 & & \end{array}\oplus\begin{array}{ll}\times & \times \\ \times & 1 \\ 1 & 2 \end{array}\oplus\begin{array}{ll}\times & \times \\ \times & 1 \\ 1 & \\ 2 & \end{array}$$

经检验, 等式两边表示的维数确实是相等的

$$20\times 2\times 2=9+10+5+2\times 16+10+5+9\ .$$

这方法也可用来计算 S_{n+m} 群的表示 $[\omega]$, 作为子群 $\mathrm{S}_n\otimes\mathrm{S}_m$ 的分导表示, 按子群不可约表示 $[\lambda]\times[\mu]$ 约化的问题. 此时, 逐个把 S_n 群不可约表示的杨图 $[\lambda]$ 嵌入

杨图 $[\omega]$ 中, 并把嵌入的杨图 $[\lambda]$ 的格子填以 ×. 若杨图 $[\lambda]$ 无法嵌入, 则排除. 在余下的格子中, 分别尝试把 S_m 群各种不等价不可约表示杨图 $[\mu]$, 按立特武德 - 理查森规则补入, 每一种不同的补法都代表在分导表示 $[\omega]$ 中出现的一个子群表示.

例 2 S_6 群表示 $[3,2,1]$, 作为子群 $S_3 \otimes S_3$ 的分导表示, 按子群不可约表示约化.

× × ×		× × 1		× × 1		× × 1		× × 1		× 1 1
1 1	⊕	× 1	⊕	× 1	⊕	× 2	⊕	× 2	⊕	× 2
2		1		2		1		3		×

即

$$[3,2,1] \simeq [3]\times[2,1] \oplus [2,1]\times[3] \oplus 2\,[2,1]\times[2,1] \oplus [2,1]\times[1,1,1] \oplus [1,1,1]\times[2,1]$$

检验等式两边表示的维数

$$16 = 1\times 2 + 2\times 1 + 2\times 2\times 2 + 2\times 1 + 1\times 2\,.$$

习 题

1. 把下列置换化为无公共客体的轮换乘积

(1) $(1\ 2)(2\ 3)(1\ 2)$, (2) $(1\ 2\ 3)(1\ 3\ 4)(3\ 2\ 1)$, (3) $(1\ 2\ 3\ 4)^{-1}$,

(4) $(1\ 2\ 4\ 5)(4\ 3\ 2\ 6)$, (5) $(1\ 2\ 3)(4\ 2\ 6)(3\ 4\ 5\ 6)$.

2. 证明长度为 ℓ 的轮换, 自乘 ℓ 次方等于恒元, 即它的阶数为 ℓ.

3. 写出对应下列杨表的杨算符

(1)

1	2	3
4		

, (2)

1	2
3	4

, (3)

1	2	3	4
5			

.

4. 具体写出 S_4 群恒元按杨算符的展开式.

5. 下列两正则杨算符乘积 $\mathcal{Y}_1\mathcal{Y}_2$ 不为零, R 把正则杨表 $\mathcal{Y}_2$ 变成正则杨表 $\mathcal{Y}_1$, 试把 R 表成属杨表 $\mathcal{Y}_2$ 的横向置换 P_2 和纵向置换 Q_2 的乘积 P_2Q_2, 再表成属杨表 $\mathcal{Y}_1$ 的横向置换 P_1 和纵向置换 Q_1 的乘积 P_1Q_1

$\mathcal{Y}_1 =$

1	2	3	4
5	6	7	
8	9		

, $\mathcal{Y}_2 =$

1	2	4	7
3	5	9	
6	8		

6. 在标准基下计算 S_3 群不可约表示 [2, 1] 自乘分解的克莱布施 – 戈登系数.

7. 具体写出 S_4 群不可约表示 [3, 1] 全部九个标准基, 用列表法计算在此标准基中相邻客体对换 P_1, P_2 和 P_3 的表示矩阵.

8. 具体写出 S_4 群相邻客体对换 P_a 在不可约表示 [3, 1] 的正交基中的实正交表示矩阵形式, 计算此表示与上题标准基中的矩阵形式间的相似变换矩阵, 并利用式 (6.128) 计算九个正交基 $\Phi_{\nu\mu}$ 在群代数自然基中的矢量形式.

9. 用列表法计算 S_5 群生成元 (1 2) 和 (1 2 3 4 5) 在不可约表示 [2, 2, 1] 中的表示矩阵.

10. 用等效方法计算 S_6 群各类在下列不可约表示中的特征标

(1) 表示 [3, 2, 1],　(2) 表示 [3, 3],　(3) 表示 [2, 2, 2].

11. 分别写出 S_6 群相邻客体对换 P_a 在不可约表示 [3, 3] 和 [2, 2, 2] 正交基中的实正交表示矩阵形式. 因为下式两边的表示是等价的

$$[2, 2, 2] \simeq [1^6] \times [3, 3]$$

试计算它们间的相似变换矩阵 X.

12. 用立特武德 – 理查森规则计算下列置换群表示外积的约化

(1) $[3, 2, 1] \otimes [3]$,　(2) $[3, 2] \otimes [2, 1]$,　(3) $[2, 1] \otimes [4, 2^3]$.

13. 用立特武德 – 理查森规则计算, S_6 群下列不可约表示关于子群 $S_3 \otimes S_3$ 的分导表示, 按子群不可约表示的约化

(1) [4, 2],　(2) [2, 2, 1, 1],　(3) [3, 3].

第七章　李群和李代数

本章研究李群和李代数的一般理论. 在第四章讲述三维空间转动群及其覆盖群时已经简单介绍了李群和李代数的概念和基本性质. 本章从复习这些概念和性质出发, 讲述半单李代数的判据, 半单李代数生成元的正则对易关系, 用邓金图的方法讨论半单李代数的分类, 把物理学中常见的李群 [SU(N) 群, SO(N) 群和 USp(2ℓ) 群] 与此分类联系起来, 然后引进基本主权和谢瓦莱 (Chevalley) 基, 用方块权图方法计算单纯李代数的不可约表示, 用主权图方法计算不可约表示的直乘分解. 后面几章再详细研究这些具体李群的性质.

7.1　李代数和结构常数

先复习第四章介绍过的李群和李代数的概念和基本性质, 并从新的角度来认识李代数的重要性, 为一般讨论半单李代数的分类打好基础.

一、李群的整体性质和局域性质

李群元素 R 可以用一组在一定区域内连续变化的独立实参数 $(r_1, r_2, \cdots)$ 来描写, 参数变化的区域称为群空间, 群空间的维数, 即独立实参数的数目称为李群的阶数. 两个群元素乘积的参数是两元素参数的实解析函数, 称为组合函数

$$T = RS \ , \qquad t_A = f_A(r_1, r_2, \cdots; s_1, s_2, \cdots) = f_A(r; s) \tag{7.1}$$

组合函数必须满足一定的条件, 以保证此集合满足群的四个基本性质.

通常选择李群的实参数, 使恒元对应的参数为零, 恒元附近的元素对应的参数是无穷小量, 称为无穷小元素. 无穷小元素决定了李群的局域性质, 李群群空间的拓扑性质决定了李群的整体性质.

如果群空间是连通的, 则此李群称为简单李群. 如果群空间分成不相连接的几片, 则此李群称为混合李群. 混合李群的群空间中, 包含恒元的那一连续片, 对应的元素集合构成简单李群, 它是混合李群的一个不变子李群, 其他每一连续片对应元素的集合分别是此不变子李群的陪集. 混合李群的性质由此简单李群和每一陪集中一个代表元素的性质决定.

如果简单李群的群空间是多连通的, 则一定存在另一个群空间是单连通的简单李群, 它与原简单李群有多一对应的同态关系, 称为原简单李群的覆盖群. 覆盖群的存在是李群有多值表示的数学基础.

如果李群的群空间是欧氏空间的闭区域, 则此李群称为紧致李群, 若是开区域, 则称非紧致李群. 对紧致李群, 可以定义群上的积分, 从而使有限群的大部分性质都可推广到紧致李群中来, 例如表示的幺正性和表示的完全可约性, 不等价不可约表示矩阵元素作为群上函数的正交性等. 非紧致李群的表示, 通常是由与它"接近"的紧致李群的表示得到的.

不存在非平庸的不变子李群的李群称为单纯李群. 不存在阿贝尔不变子李群 (包括全体) 的李群称为半单李群. 一阶李群是单纯李群, 但不是半单李群. 高于一阶的单纯李群一定是半单李群.

研究李群的无穷小元素, 可以了解李群的局域性质和某些整体性质, 并可以对李群进行分类. 这是本章研究的重点.

二、生成元和结构常数

在李群的线性表示中, 恒元对应单位矩阵, 无穷小元素的表示矩阵可按无穷小参数展开, 取到一级小量, 得

$$D(R) = \mathbf{1} - \mathrm{i}\sum_A r_A I_A \ , \qquad I_A = \mathrm{i} \left. \frac{\partial D(R)}{\partial r_A} \right|_{r=0} \tag{7.2}$$

I_A 称为该表示的生成元. 如果表示是真实的, 则生成元是线性无关的.

李氏第一定理告诉我们, 简单李群元素的表示矩阵, 可以由生成元通过解微分方程得到

$$\frac{\partial D(R)}{\partial r_A} = -\mathrm{i}\sum_B I_B S_{BA}(r) D(R) \ , \qquad D(R)|_{R=E} = \mathbf{1} \tag{7.3}$$

其中, 实函数

$$S_{BA}(r) = \left. \frac{\partial f_B(r;s)}{\partial r_A} \right|_{s=\overline{r}} \tag{7.4}$$

与具体表示无关, 只依赖于给定的李群和选定的实参数, 其中 $\overline{r}$ 是逆元 R^{-1} 的参数. 李氏第二定理告诉我们, 李群线性表示的生成元满足共同的对易关系

$$[I_A,\ I_B] = \mathrm{i}\sum_D C_{AB}^{\ \ D} I_D \tag{7.5}$$

对于给定的李群和选定的实参数, $C_{AB}^{\ \ D}$ 是一组与表示无关的实常数, 称为李群的结构常数. 结构常数常由一已知表示生成元来计算. 当参数重新选择时, 生成元和结构常数都要做相应的组合

$$\begin{aligned} r'_A &= \sum_B r_B \left(X^{-1}\right)_{BA} \ , \qquad I'_A = \sum_B X_{AB} I_B \ , \qquad \det X \neq 0, \\ C'^{\ \ D}_{AB} &= \sum_{A'B'D'} X_{AA'} X_{BB'} C_{A'B'}^{\ \ \ D'} \left(X^{-1}\right)_{D'D} \end{aligned} \tag{7.6}$$

李氏第三定理告诉我们, 作为李群结构常数的充要条件是满足

$$C_{AB}^{D}=-C_{BA}^{D}, \qquad \sum_{P}\left\{C_{AB}^{P}C_{PD}^{Q}+C_{BD}^{P}C_{PA}^{Q}+C_{DA}^{P}C_{PB}^{Q}\right\}=0 \tag{7.7}$$

根据结构常数的性质可以对李群和李代数进行分类.

伴随表示是李群的一个十分重要的表示. 设 I_A 是表示 $D(G)$ 的生成元, 则李群的伴随表示 $D^{\rm ad}(G)$ 满足

$$D(R)I_BD(R)^{-1}=\sum_{D}\ I_DD_{DB}^{\rm ad}(R) \tag{7.8}$$

当 R 取无穷小元素时, 得

$$[I_A,\ I_B]=\sum_{D}\ I_D\left(I_A^{\rm ad}\right)_{DB}\ , \qquad \left(I_A^{\rm ad}\right)_{DB}={\rm i}C_{AB}^{\ \ D} \tag{7.9}$$

李群生成元和结构常数描写了李群的局域性质和部分整体性质. 若李群所有结构常数为零, 则李群是阿贝尔群. 若李群伴随表示是不可约表示, 则李群是单纯李群. 如果存在实参数, 使结构常数关于三个指标完全反对称, 则伴随表示是实正交表示, 李群是紧致李群.

三、实李代数和复李代数

任取一组满足式 (7.7) 的常数 $C_{AB}^{\ \ D}$, 根据李氏第三定理, 存在 g 阶李群, 以 $C_{AB}^{\ \ D}$ 为结构常数. 设 I_A 是李群某真实表示的生成元. 以 $(-{\rm i}I_A)$ 作为基, 它的所有实线性组合构成一个 g 维实线性空间. 此线性空间矢量乘积的定义是, 系数部分作数的乘积, 生成元部分作对易关系, 称为李乘积

$$[(-{\rm i}I_A)\,,\ (-{\rm i}I_B)]=\sum_{D}\ C_{AB}^{\ \ D}\,(-{\rm i}I_D) \tag{7.10}$$

此实空间关于李乘积是封闭的, 构成代数, 称为实李代数, 记作 $\mathcal{L}_R$. 如果把此实空间推广到复空间, 在相同的矢量乘积定义下, 实李代数变成了复李代数, 简称李代数, 记作 $\mathcal{L}$. 复李代数称为实李代数的复化, 实李代数称为复李代数的实形. 同一复李代数的实形不唯一. 本书只讨论有实形的复李代数. $C_{AB}^{\ \ D}$ 称为此李群和李代数共同的结构常数.

这里强调实李代数, 是因为李群的紧致性只有在实李代数中才表现出来. 例如, SO(4) 群是四维实空间的正交变换群. 把空间第四个坐标变成纯虚数 $x_4={\rm i}ct$, 四维正交变换群就变成了洛伦兹群. SO(4) 群是紧致李群, 而固有洛伦兹群是非紧致李群, 两个群的差别只是参数的实数性条件不一样. 如果规定参数都选实数, 把参数中的 i 归并到生成元中去, 则两个李群的实李代数就不同了, 但它们的复李代数是

一样的. 如果允许固有洛伦兹群的某些参数取纯虚数, 则在 SO(4) 群和固有洛伦兹群的对应不可约表示中, 生成元对应相同, 由 SO(4) 群的不可约表示, 就可找出固有洛伦兹群的不可约表示. 这是找非紧致李群不等价不可约表示的标准方法, 我们将在第九章详细讨论. 紧致李群的实李代数称为紧致实李代数.

由于对易关系满足雅可比恒等式, 李乘积显然不满足结合律

$$[I_A,\ [I_B,\ I_C]] - [[I_A,\ I_B]\,,\ I_C] = [I_B,\ [I_A,\ I_C]] \tag{7.11}$$

因此实李代数和复李代数都不是结合代数.

由于结构常数主要描写李群的局域性质, 由结构常数建立的李群不是唯一的, 有相同结构常数的李群称为局域同构. 李群局域同构而又不同构的两个典型的例子是, SO(3) 群和 SU(2) 群, U(2) 群和 SU(2)⊗U(1). 这两对李群分别有相同的实李代数, 因而它们局域同构. 但整体来说, SO(3) 群和 SU(2) 群同态而不同构. U(2) 群中虽然包含子群 SU(2) 和 U(1), 但这两子群除恒元外还有公共元素, 它们不是直乘的关系.

李代数, 或实李代数, 作为一个代数, 可以引入子代数, 直和和半直和, 理想和阿贝尔理想, 单纯性, 半单性, 可解性, 同构和同态, 线性表示和伴随表示等一系列概念. 下面就李代数, 简要地复习和介绍这些概念,

如果李代数 $\mathcal{L}$ 中部分矢量的集合 $\mathcal{L}_1$, 对线性组合和矢量乘积是封闭的, 则称为子李代数, 即子空间 $\mathcal{L}_1$ 中的任意矢量 X 和 Y, 对任意复常数 c_1 和 c_2, 有

$$c_1X + c_2Y \in \mathcal{L}_1\ , \qquad [X,\ Y] \in \mathcal{L}_1 \tag{7.12}$$

进一步, 若对子李代数 $\mathcal{L}_1$ 的任意矢量 X 和李代数 $\mathcal{L}$ 的任意矢量 Y, 有

$$[X,\ Y] \in \mathcal{L}_1\ , \qquad X \in \mathcal{L}_1\ , \qquad Y \in \mathcal{L} \tag{7.13}$$

则 $\mathcal{L}_1$ 称为 $\mathcal{L}$ 的理想. 对李代数, 不区分左理想和右理想. 除了全体和零空间外, 不存在理想的李代数称为单纯李代数. 如果理想中矢量的李乘积都为零, 则此理想称为阿贝尔理想. 除了零空间外, 不存在阿贝尔理想的李代数称为半单李代数. 一维李代数必是单纯李代数, 但不是半单李代数. 高于一维的单纯李代数一定是半单李代数.

如果李代数 $\mathcal{L}$ 中两个子李代数 $\mathcal{L}_1$ 和 $\mathcal{L}_2$ 满足

$$\mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2 = \mathcal{L}\ , \qquad \mathcal{L}_1 \bigcap \mathcal{L}_2 = \varnothing\ , \qquad [\mathcal{L}_1,\ \mathcal{L}_2] = 0 \tag{7.14}$$

则李代数 $\mathcal{L}$ 称为两个子李代数 $\mathcal{L}_1$ 和 $\mathcal{L}_2$ 的直和, 记作

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 \oplus \mathcal{L}_2 \tag{7.15}$$

显然 $\mathcal{L}_1$ 和 $\mathcal{L}_2$ 都是 $\mathcal{L}$ 的理想. 把这一条件稍放宽, 若

$$\mathcal{L}_1+\mathcal{L}_2=\mathcal{L}\ ,\qquad \mathcal{L}_1\bigcap\mathcal{L}_2=\varnothing\ ,\qquad [\mathcal{L}_1,\ \mathcal{L}_2]\subset\mathcal{L}_1 \tag{7.16}$$

则李代数 $\mathcal{L}$ 称为子李代数 $\mathcal{L}_1$ 和 $\mathcal{L}_2$ 的半直和, 记作

$$\mathcal{L}=\mathcal{L}_1\oplus_s\mathcal{L}_2 \tag{7.17}$$

其中, 只有子李代数 $\mathcal{L}_1$ 是李代数 $\mathcal{L}$ 的理想, 子李代数 $\mathcal{L}_2$ 则不是理想. 由李代数 $\mathcal{L}$ 可以定义一系列子李代数

$$\mathcal{L}^{(1)}=[\mathcal{L},\ \mathcal{L}]\ ,\qquad \mathcal{L}^{(2)}=\left[\mathcal{L}^{(1)},\ \mathcal{L}^{(1)}\right]\ ,\ \cdots \tag{7.18}$$

若对 $\mathcal{L}$ 存在整数 n, 使 $\mathcal{L}^{(n)}=0$ 成立, 则 $\mathcal{L}$ 称为可解李代数. 可以证明, 任意李代数 $\mathcal{L}$ 都可分解为一个可解李代数 $\mathcal{L}_1$ 和一个半单李代数 $\mathcal{L}_2$ 的半直和

$$\mathcal{L}=\mathcal{L}_1\oplus_s\mathcal{L}_2$$

当 $\mathcal{L}_1=0$ 时, $\mathcal{L}$ 是半单李代数. 可解李代数所有有限维不可约表示都是一维的. 本章将集中研究半单李代数的性质.

若两李代数 $\mathcal{L}'$ 和 $\mathcal{L}$ 的基及其线性组合一一对应, 而且矢量乘积仍按同一规则一一对应, 则称此两李代数同构. 同构的李代数在对应的基中结构常数相同, 因此相应的李群局域同构. 若上述一一对应关系改为一多对应关系, 则称李代数 $\mathcal{L}'$ 与李代数 $\mathcal{L}$ 同态. 当李代数 $\mathcal{L}'$ 与李代数 $\mathcal{L}$ 同态时, 李代数 $\mathcal{L}$ 必可表为两个子李代数 $\mathcal{L}_1$ 和 $\mathcal{L}_2$ 的半直和, 其中 $\mathcal{L}_1$ 是李代数 $\mathcal{L}$ 的理想, 并与李代数 $\mathcal{L}'$ 的零矢量相对应, 称为同态对应的核, 而子李代数 $\mathcal{L}_2$ 与李代数 $\mathcal{L}'$ 同构. 若李代数 $\mathcal{L}'$ 的元素是矩阵, 且与李代数 $\mathcal{L}$ 同构或同态, 则李代数 $\mathcal{L}'$ 称为李代数 $\mathcal{L}$ 的线性表示, 或称模 (module). 若李代数两个表示的基 (生成元) 可通过同一种相似变换联系起来, 则称为等价表示. 若李代数表示的表示空间对此李代数不存在非平庸的不变子空间, 则此表示称为不可约表示. 若李代数表示的基 (生成元) 可通过式 (7.9) 由结构常数表出, 则此表示称为伴随表示. 在局域的意义上, 李群和李代数, 实李代数和复李代数, 有共同的线性表示.

四、基林型和嘉当判据

李氏第三定理告诉我们, 根据结构常数的性质可以对李代数进行分类. 但是对于给定的李群和李代数, 由于参数的不同选择, 生成元和结构常数都按式 (7.6) 发生相应的组合, 可见不是结构常数的全部性质都反映李代数本质的性质. 必须首先把结构常数中反映李代数本质的性质提炼出来, 才能用来对李代数进行分类. 基林型就是结构常数中反映李代数本质的性质.

由结构常数 $C_{AB}^{\ \ D}$ 定义基林型 g_{AB}

$$g_{AB} = \sum_{PQ} C_{AP}^{\ \ Q} C_{BQ}^{\ \ P} = -\mathrm{Tr}\left(I_A^{\mathrm{ad}} I_B^{\mathrm{ad}}\right) \tag{7.19}$$

g_{AB} 关于下标对称. 若把它看作度规张量, 可以定义关于三个下标全反对称的协变结构常数 C_{ABD}

$$C_{ABD} = \sum_{P} C_{AB}^{\ \ P} g_{PD} = -C_{BAD} = -C_{ADB} \tag{7.20}$$

证明如下

$$\begin{aligned} C_{ABD} &= \sum_{PQR} C_{AB}^{\ \ P} C_{PQ}^{\ \ R} C_{DR}^{\ \ Q} \\ &= -\sum_{PQR} \left\{C_{BQ}^{\ \ P} C_{PA}^{\ \ R} + C_{QA}^{\ \ P} C_{PB}^{\ \ R}\right\} C_{DR}^{\ \ Q} \\ &= \sum_{PQR} \left\{C_{BQ}^{\ \ P} C_{AP}^{\ \ R} C_{DR}^{\ \ Q} - C_{AQ}^{\ \ P} C_{BP}^{\ \ R} C_{DR}^{\ \ Q}\right\} \end{aligned}$$

上式关于三个指标 A, B 和 D 是完全反对称的. 证完.

按照附录 15 给出的张量的概念, 当参数按式 (7.6) 组合时, 生成元 I_A 是关于 X 变换的协变矢量, 结构常数 $C_{AB}^{\ \ D}$ 是 (2,1) 阶混合张量, C_{ABD} 是三阶完全反对称协变张量, 基林型 g_{AB} 是二阶对称协变张量

$$g'_{AB} = \sum_{A'B'} X_{AA'} X_{BB'} g_{A'B'}\ , \qquad g' = XgX^T \tag{7.21}$$

对实李代数, 基林型是实对称矩阵. 实对称矩阵 g_{AB} 可通过实正交相似变换对角化, 再通过对角的标度变换, 可把对角元化为 ±1 或 0, 但不能改变对角元的符号和零对角元的数目. 这就是说, 通过李群实参数的重新选择, 可以把基林型化为对角形式, 对角元等于 ±1 和 0. 对复李代数, 基林型对角元的符号也变得不重要了, 但零对角元的数目是反映此李代数的本质的, 不能通过参数选择而改变. 嘉当判据揭示了这一本质.

定理一 (嘉当判据)　半单李代数的充要条件是

$$\det\ g \neq 0 \tag{7.22}$$

紧致半单实李代数的充要条件是基林型是负定的.

我们不证明此定理, 附录 21 将对此定理做一些解释. 既然半单李代数的基林型为非奇, g_{AB} 存在逆矩阵, 记作 g^{AB}, 它也是对称矩阵, 满足

$$\sum_{D} g^{AD} g_{DB} = \delta_B^A \tag{7.23}$$

g_{AB} 和 g^{AB} 相当于度规张量, 可以用来升降指标. 由此度规张量可定义半单李代数的 n 阶卡西米尔 (Casimir) 算子 C_n, 就是由生成元的 n 次齐次多项式构成的, 可与所有生成元对易的算子, 详见附录 22.

7.2 半单李代数的正则形式

本节将按照标准形式选择半单李代数的生成元, 从而证明半单李代数都有紧致实形.

一、半单李代数的内积

采用量子力学中的常用符号, 把李代数的基 (生成元) 表成

$$|I_A\rangle \equiv |A\rangle\ , \qquad 1 \leqslant A \leqslant g \tag{7.24}$$

用基林型来定义基的内积

$$\langle A|B\rangle = -g_{AB} = \mathrm{Tr}\left(I_A^{\mathrm{ad}} I_B^{\mathrm{ad}}\right) \tag{7.25}$$

其中, 上标 ad 表该生成元属伴随表示. 这样的内积是双线性的, 满足

$$\begin{aligned}
&\langle A|(c_1 B + c_2 D)\rangle = c_1\langle A|B\rangle + c_2\langle A|D\rangle,\\
&\langle (c_1 A + c_2 D)|B\rangle = c_1\langle A|B\rangle + c_2\langle D|B\rangle,\\
&\langle A|B\rangle = \langle B|A\rangle,\\
&\langle A|D|B\rangle \equiv \langle A|\,[D,\ B]\rangle = \langle [A,\ D]\,|B\rangle
\end{aligned} \tag{7.26}$$

当另选新基时, 这内积正好等于在新基中的基林型的负值

$$\begin{aligned}
&|X_\mu\rangle = |\sum_A\ X_{\mu A} I_A\rangle = \sum_A\ X_{\mu A}|A\rangle,\\
&\langle X_\mu|X_\nu\rangle = -\sum_{AB}\ X_{\mu A} X_{\nu B} g_{AB} = -g_{\mu\nu}
\end{aligned} \tag{7.27}$$

这样, 我们可以在复李代数中任意选择基来研究.

二、嘉当子代数和李代数的秩

李代数中的任一矢量, 同时也是线性算符, 它通过对易关系对另一矢量作用

$$X|Y\rangle = |\,[X,\ Y]\rangle \tag{7.28}$$

由此可以计算算符 X 的本征值和本征矢量. 很明显, 任何算符同时是自己的零本征值的本征矢量

$$X|X\rangle = |\,[X,\ X]\rangle = 0$$

设 X 零本征值的重数是 ℓ_X, 在所有 X 中, 最小的 ℓ_X 值记作 ℓ

$$\ell = \min \ell_X > 0 \tag{7.29}$$

称为李代数 $\mathcal{L}$ 的秩, 也是对应李群的秩. 若 $\ell_X = \ell$, 则 X 称为正则矢量.

定理二 秩为 ℓ 的半单李代数 $\mathcal{L}$ 的正则矢量 X, 存在 ℓ 个互相对易的线性无关的零本征值的本征矢量 H_j

$$[H_j,\ H_k] = 0\ , \qquad 1 \leqslant j \leqslant \ell\ , \qquad 1 \leqslant k \leqslant \ell \tag{7.30}$$

X 是 H_j 的线性组合. 在李代数余下的子空间中, ℓ 个 H_j 的 $g-\ell$ 个共同本征矢量 $E_{\boldsymbol{\alpha}}$ 不简并

$$H_j|E_{\boldsymbol{\alpha}}\rangle = \alpha_j|E_{\boldsymbol{\alpha}}\rangle\ , \qquad [H_j,\ E_{\boldsymbol{\alpha}}] = \alpha_j E_{\boldsymbol{\alpha}} \tag{7.31}$$

即其中矢量 $\boldsymbol{\alpha}$ 不重复, 且 $\boldsymbol{\alpha}$ 的分量 α_j 不同时为零.

对此定理不做证明. ℓ 个 H_j 架设李代数 $\mathcal{L}$ 中一个 ℓ 维阿贝尔子李代数, 称为半单李代数的嘉当子代数, 记作 $\mathcal{H}$, H_j 称为嘉当基. 嘉当子代数不是 $\mathcal{L}$ 的理想. ℓ 维空间的矢量 $\boldsymbol{\alpha}$ 称为 $E_{\boldsymbol{\alpha}}$ 的根矢量, 简称根, 这 ℓ 维空间称为根空间. 可以说 H_j 对应零根, 零根的重数是 ℓ. 在 $\mathcal{L}$ 中, 嘉当子代数的选择不是唯一的, 但不同的选择互相是共轭的, 即存在群元素 R 把两组 H_j 联系起来

$$RH_jR^{-1} = H_j'\ , \qquad R \in G \tag{7.32}$$

三、生成元的正则对易关系

我们已经得到了半单李代数 $\mathcal{L}$ 的一组新的基 H_j 和 $E_{\boldsymbol{\alpha}}$, 称为嘉当 (Cartan)-外尔 (Weyl) 基, 或称正则基. 现在来进一步研究它们的性质.

正则基满足对易关系式 (7.30) 和 (7.31). 由式 (7.26) 得

$$\langle E_{\boldsymbol{\beta}}|H_j|E_{\boldsymbol{\alpha}}\rangle = \alpha_j\langle E_{\boldsymbol{\beta}}|E_{\boldsymbol{\alpha}}\rangle = -\beta_j\langle E_{\boldsymbol{\beta}}|E_{\boldsymbol{\alpha}}\rangle$$

即

$$(\alpha_j + \beta_j)\,\langle E_{\boldsymbol{\beta}}|E_{\boldsymbol{\alpha}}\rangle = 0 \tag{7.33}$$

当两根 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 不互差符号时, $\langle E_{\boldsymbol{\alpha}}|E_{\boldsymbol{\beta}}\rangle = 0$. 同理

$$\langle H_j|E_{\boldsymbol{\alpha}}\rangle = 0 \tag{7.34}$$

如果 $-\boldsymbol{\alpha}$ 不是根, 则 $|E_{\boldsymbol{\alpha}}\rangle$ 与李代数所有基正交, 基林型第 $\boldsymbol{\alpha}$ 行全为零, 这与李代数的半单性矛盾. 因此根矢量必须正负成对. 选择 $E_{\boldsymbol{\alpha}}$ 的相乘系数, 可使

$$\langle E_{-\boldsymbol{\alpha}}|E_{\boldsymbol{\alpha}}\rangle = -g_{(-\boldsymbol{\alpha})\boldsymbol{\alpha}} = 1 \tag{7.35}$$

把与嘉当子代数相关的基林型记作 g_{jk}, 它的行列式也必须非零

$$\langle H_j|H_k\rangle = -g_{jk}\ , \qquad \det\,(g_{jk}) \neq 0 \tag{7.36}$$

g_{jk} 存在逆矩阵 g^{jk}, 它们可以看成根空间的度规张量, 用来升降指标

$$\sum_t g^{jt} g_{tk} = \delta^j_k \tag{7.37}$$

这样, 在正则基中, 半单李代数的基林型表为方块矩阵的形式

$$g_{AB} = \begin{pmatrix} g_{jk} & & & & & \\ & 0 & -1 & & & \\ & -1 & 0 & & & \\ & & & 0 & -1 & \\ & & & -1 & 0 & \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{7.38}$$

由雅可比恒等式得

$$\begin{aligned} 0 &= [H_j,\ [E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{\boldsymbol{\beta}}]] + [E_{\boldsymbol{\alpha}},\ [E_{\boldsymbol{\beta}},\ H_j]] + [E_{\boldsymbol{\beta}},\ [H_j,\ E_{\boldsymbol{\alpha}}]] \\ &= [H_j,\ [E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{\boldsymbol{\beta}}]] - \beta_j\,[E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{\boldsymbol{\beta}}] + \alpha_j\,[E_{\boldsymbol{\beta}},\ E_{\boldsymbol{\alpha}}] \end{aligned}$$

即

$$[H_j,\ [E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{\boldsymbol{\beta}}]] = (\alpha_j + \beta_j)\,[E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{\boldsymbol{\beta}}]$$

由于非零根矢量是不简并的, 有

$$[E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{\boldsymbol{\beta}}] = \begin{cases} N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} E_{\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}}, & \text{当}\ \ \boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}\ \ \text{是根} \\ \sum_j \lambda^j H_j, & \text{当}\ \ \boldsymbol{\beta} = -\boldsymbol{\alpha} \\ 0, & \text{其他} \end{cases} \tag{7.39}$$

系数 $N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}$ 关于下标反对称, 它的性质以后再讨论. 先计算 λ^j

$$\begin{aligned} -\sum_j g_{kj}\lambda^j &= \sum_j \langle H_k|H_j\rangle\ \lambda^j = \langle H_k|E_{\boldsymbol{\alpha}}|E_{-\boldsymbol{\alpha}}\rangle \\ &= \langle [H_k,\ E_{\boldsymbol{\alpha}}]\,|E_{-\boldsymbol{\alpha}}\rangle = \alpha_k \langle E_{\boldsymbol{\alpha}}|E_{-\boldsymbol{\alpha}}\rangle = \alpha_k, \\ \lambda^j &= -\sum_k g^{jk}\alpha_k \end{aligned} \tag{7.40}$$

λ^j 正是根矢量的逆变分量. 因此这对易关系也经常被表成矢量点乘的形式

$$[E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{-\boldsymbol{\alpha}}] = \sum_j \alpha^j H_j = \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{H} \equiv H_{\boldsymbol{\alpha}} \tag{7.41}$$

归结式 (7.30)、(7.31) 和 (7.39), 得到嘉当 - 外尔基的正则对易关系

$$\begin{aligned} &[H_j,\ H_k] = 0\ , \qquad [H_j,\ E_{\boldsymbol{\alpha}}] = \alpha_j E_{\boldsymbol{\alpha}} \\ &[E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{\boldsymbol{\beta}}] = \begin{cases} N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} E_{\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}}, & \text{当}\ \ \boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}\ \ \text{是根} \\ \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{H}, & \text{当}\ \ \boldsymbol{\beta} = -\boldsymbol{\alpha} \\ 0, & \text{其他} \end{cases} \end{aligned} \tag{7.42}$$

其中, 系数 $N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}$ 尚待确定. g_{jk} 可表为根矢量的乘积

$$g_{jk} = \sum_{AB} C_{jA}{}^{B} C_{kB}{}^{A} = \sum_{\boldsymbol{\alpha}} C_{j\boldsymbol{\alpha}}{}^{\boldsymbol{\alpha}} C_{k\boldsymbol{\alpha}}{}^{\boldsymbol{\alpha}} = -\sum_{\boldsymbol{\alpha}\in\Delta} \alpha_j \alpha_k \tag{7.43}$$

其中, Δ 是半单李代数全部根矢量的集合.

四、根矢量的内积

利用根空间的度规 $-g_{jk}$, 可以定义根空间两矢量的内积

$$\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{U} = \sum_j V^j U_j = -\sum_{jk} g_{jk} V^j U^k = \sum_{jk} \sum_{\boldsymbol{\alpha}\in\Delta} \left(\alpha_j V^j\right)\left(\alpha_k U^k\right) = \sum_{\boldsymbol{\alpha}\in\Delta} (\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{V})(\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{U}) \tag{7.44}$$

下面定理将给出根矢量的许多重要性质, 为证明半单李代数必有紧致实型奠定基础.

定理三 设 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 是半单李代数的两个非零根, 则

$$\Gamma(\boldsymbol{\alpha}/\boldsymbol{\beta}) \equiv \frac{2\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\beta}}{\boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\beta}} = \text{整数} \tag{7.45}$$

且 $\boldsymbol{\alpha} - \Gamma(\boldsymbol{\alpha}/\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\beta}$ 也是根.

证明 在根 $\boldsymbol{\alpha}$ 上若干次加和减根 $\boldsymbol{\beta}$, 得到一个根链

$$\cdots,\ (\boldsymbol{\alpha}-2\boldsymbol{\beta}),\ (\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}),\ \boldsymbol{\alpha},\ (\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}),\ (\boldsymbol{\alpha}+2\boldsymbol{\beta}),\ \cdots$$

因为李代数中根的数目是有限的, 所以此根链在两端都会中断. 不失普遍性, 设

$$\begin{array}{llll} \boldsymbol{\alpha}+n\boldsymbol{\beta}\ , & & -q \leqslant n \leqslant p\ , & \text{都是根} \\ \boldsymbol{\alpha}-(q+1)\boldsymbol{\beta} & \text{和} & \boldsymbol{\alpha}+(p+1)\boldsymbol{\beta} & \text{不是根} \end{array} \tag{7.46}$$

其中, p 和 q 都是非负整数. 由式 (7.39) 得

$$N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} = -N_{\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha}}\ , \qquad N_{(\boldsymbol{\alpha}+p\boldsymbol{\beta}),\boldsymbol{\beta}} = N_{(\boldsymbol{\alpha}-q\boldsymbol{\beta}),-\boldsymbol{\beta}} = 0$$

令

$$F_n = -N_{(\boldsymbol{\alpha}+n\boldsymbol{\beta}),\boldsymbol{\beta}} N_{(\boldsymbol{\alpha}+(n+1)\boldsymbol{\beta}),-\boldsymbol{\beta}}, \qquad F_p = F_{-q-1} = 0 \tag{7.47}$$

则由雅可比恒等式得

$$\begin{aligned} 0 =& [E_{\boldsymbol{\alpha}+n\boldsymbol{\beta}}, [E_{\boldsymbol{\beta}}, E_{-\boldsymbol{\beta}}]] + [E_{\boldsymbol{\beta}}, [E_{-\boldsymbol{\beta}}, E_{\boldsymbol{\alpha}+n\boldsymbol{\beta}}]] + [E_{-\boldsymbol{\beta}}, [E_{\boldsymbol{\alpha}+n\boldsymbol{\beta}}, E_{\boldsymbol{\beta}}]] \\ =& \sum_j \beta^j [E_{\boldsymbol{\alpha}+n\boldsymbol{\beta}}, H_j] - N_{(\boldsymbol{\alpha}+n\boldsymbol{\beta}),-\boldsymbol{\beta}} [E_{\boldsymbol{\beta}}, E_{\boldsymbol{\alpha}+(n-1)\boldsymbol{\beta}}] + N_{(\boldsymbol{\alpha}+n\boldsymbol{\beta}),\boldsymbol{\beta}} [E_{-\boldsymbol{\beta}}, E_{\boldsymbol{\alpha}+(n+1)\boldsymbol{\beta}}] \\ =& \{-\boldsymbol{\beta}\cdot(\boldsymbol{\alpha}+n\boldsymbol{\beta}) - F_{n-1} + F_n\} E_{\boldsymbol{\alpha}+n\boldsymbol{\beta}} \end{aligned}$$

由此得递推关系

$$\begin{aligned} F_n &= F_{n-1} + \boldsymbol{\beta}\cdot\{\boldsymbol{\alpha}+n\boldsymbol{\beta}\} \\ &= F_{n-2} + \boldsymbol{\beta}\cdot\{2\boldsymbol{\alpha}+(n+n-1)\boldsymbol{\beta}\} = \cdots \\ &= F_{n-(n+q+1)} + \boldsymbol{\beta}\cdot\left\{(n+q+1)\boldsymbol{\alpha} + \frac{1}{2}(n-q)(n+q+1)\boldsymbol{\beta}\right\} \\ &= \frac{1}{2}(n+q+1)\boldsymbol{\beta}\cdot\{2\boldsymbol{\alpha}+(n-q)\boldsymbol{\beta}\} \end{aligned} \tag{7.48}$$

当 $n = p$ 时, 有

$$2\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\beta} = (q-p)(\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\beta}) \tag{7.49}$$

若 $\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\beta} = 0$, 则 $\boldsymbol{\beta}$ 与所有根 $\boldsymbol{\alpha}$ 的内积都为零, 因而在半单李代数中存在生成元 $H_{\boldsymbol{\beta}} = \sum_j \beta^j H_j$, 它与李代数所有生成元对易

$$\begin{aligned} &[H_{\boldsymbol{\beta}},\ E_{\boldsymbol{\alpha}}] = \sum_j \beta^j [H_j,\ E_{\boldsymbol{\alpha}}] = (\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\alpha}) E_{\boldsymbol{\alpha}} = 0, \\ &[H_{\boldsymbol{\beta}},\ H_k] = 0 \end{aligned} \tag{7.50}$$

从而 $H_{\boldsymbol{\beta}}$ 构成李代数的阿贝尔理想, 这与李代数的半单性矛盾. 因此 $\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\beta} \neq 0$, 由式 (7.49) 得

$$\Gamma(\boldsymbol{\alpha}/\boldsymbol{\beta}) = \frac{2\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\beta}}{\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\beta}} = q - p \tag{7.51}$$

这就是式 (7.45). 由于 $-p \leqslant (q-p) \leqslant q$, $\boldsymbol{\alpha} - \Gamma(\boldsymbol{\alpha}/\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\beta}$ 也是根.

最后, 若根链 $\boldsymbol{\alpha}+n\boldsymbol{\beta}$ 包含零根, 例如 $\boldsymbol{\alpha} = m\boldsymbol{\beta}$, 可令对应零根的基为 $E_0 = H_{\boldsymbol{\beta}}$

$$\begin{aligned} &[E_{\boldsymbol{\alpha}-(m-1)\boldsymbol{\beta}},\ E_{-\boldsymbol{\beta}}] = [E_{\boldsymbol{\beta}},\ E_{-\boldsymbol{\beta}}] = H_{\boldsymbol{\beta}}, \\ &[E_{\boldsymbol{\alpha}-m\boldsymbol{\beta}},\ E_{\pm\boldsymbol{\beta}}] = [H_{\boldsymbol{\beta}},\ E_{\pm\boldsymbol{\beta}}] = \pm(\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\beta}) E_{\pm\boldsymbol{\beta}}, \\ &[E_{\boldsymbol{\alpha}-(m+1)\boldsymbol{\beta}},\ E_{\boldsymbol{\beta}}] = [E_{-\boldsymbol{\beta}},\ E_{\boldsymbol{\beta}}] = -H_{\boldsymbol{\beta}} \end{aligned}$$

由此算得

$$N_{(\boldsymbol{\alpha}-(m-1)\boldsymbol{\beta}),-\boldsymbol{\beta}}=1\ ,\qquad N_{(\boldsymbol{\alpha}-m\boldsymbol{\beta}),\pm\boldsymbol{\beta}}=\pm(\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\beta})\ ,\qquad N_{(\boldsymbol{\alpha}-(m+1)\boldsymbol{\beta}),\boldsymbol{\beta}}=-1$$

上述证明仍成立. 证完.

推论一　ℓ 秩半单李代数线性无关的根矢量有 ℓ 个.

证明　用反证法. 若线性无关的根矢量数目少于 ℓ 个, 则在根空间至少存在一个非零矢量 $\boldsymbol{V}$, 与所有根矢量正交, 于是 $\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{H}$ 与李代数所有生成元对易, 这与李代数的半单性矛盾.

推论二　半单李代数根矢量的任何实线性组合的内积为实数, 若此组合非零, 则它自身内积为正实数.

证明　先证根矢量本身满足此推论. 由式 (7.44) 和 (7.49) 得

$$\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\beta}=\sum_{\boldsymbol{\alpha}\in\Delta}(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\beta})^2=\frac{1}{4}\left\{\sum_{\boldsymbol{\alpha}\in\Delta}(q_{\boldsymbol{\alpha}}-p_{\boldsymbol{\alpha}})^2\right\}(\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\beta})^2\ ,$$

其中, $q_{\boldsymbol{\alpha}}$ 和 $p_{\boldsymbol{\alpha}}$ 是由根 $\boldsymbol{\alpha}$ 出发, 若干次加减根 $\boldsymbol{\beta}$ 后所得根链的参数, 它们是整数. 由于 $\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\beta}\neq 0$ 得

$$\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\beta}=4\left\{\sum_{\boldsymbol{\alpha}\in\Delta}(q_{\boldsymbol{\alpha}}-p_{\boldsymbol{\alpha}})^2\right\}^{-1}=\text{正实数}\tag{7.52}$$

代入式 (7.49) 知, 两根矢量的内积是实数. 其次, 取根的实线性组合

$$\boldsymbol{V}=\sum_{\boldsymbol{\beta}\in\Delta}b_{\boldsymbol{\beta}}\boldsymbol{\beta}\ ,\qquad \boldsymbol{V}'=\sum_{\boldsymbol{\gamma}\in\Delta}c_{\boldsymbol{\gamma}}\boldsymbol{\gamma}$$

则

$$\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{V}'=\sum_{\boldsymbol{\beta}\in\Delta}\sum_{\boldsymbol{\gamma}\in\Delta}b_{\boldsymbol{\beta}}c_{\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\gamma})=\text{实数}$$

利用式 (7.43), 有

$$\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{V}=\sum_{\boldsymbol{\alpha}\in\Delta}(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{V})^2\geqslant 0$$

只要 $\boldsymbol{V}\neq 0$, 则 $\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{V}>0$. 证完.

这样, 根空间和实欧几里得空间的性质很相像了. 我们已经知道, 对半单复李代数, 可以通过选择参数, 使基林型变成 $g_{jk}=-\delta_{jk}$. 如果再能证明根矢量都是实的, 那么根空间就满足欧几里得几何.

推论三

$$N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}N_{-\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{\beta}}=-\frac{1}{2}p(q+1)(\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\beta})\tag{7.53}$$

证明 在式 (7.48) 中, 取 $n=0$, 得

$$-N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}N_{(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}),-\boldsymbol{\beta}} = F_0 = \frac{1}{2}(q+1)\left(2\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\beta}-q\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\beta}\right) = -\frac{1}{2}p(q+1)\left(\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\beta}\right) \tag{7.54}$$

设 $\boldsymbol{\gamma}=\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$, 且这三个根都是非零根, 则

$$\begin{aligned}\langle E_{-\boldsymbol{\alpha}}|E_{-\boldsymbol{\beta}}|E_{\boldsymbol{\gamma}}\rangle &= \langle E_{-\boldsymbol{\alpha}}\left|\left[E_{-\boldsymbol{\beta}},\ E_{\boldsymbol{\gamma}}\right]\right\rangle = N_{-\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\gamma}}\langle E_{-\boldsymbol{\alpha}}|E_{\boldsymbol{\alpha}}\rangle = N_{-\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\gamma}} \\ &= \left\langle\left[E_{-\boldsymbol{\alpha}},\ E_{-\boldsymbol{\beta}}\right]\left|E_{\boldsymbol{\gamma}}\right.\right\rangle = N_{-\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{\beta}}\langle E_{-\boldsymbol{\gamma}}|E_{\boldsymbol{\gamma}}\rangle = N_{-\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{\beta}}\end{aligned}$$

由式 (7.35) 得

$$N_{-\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{\beta}} = N_{-\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\gamma}} = -N_{(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}),-\boldsymbol{\beta}} \tag{7.55}$$

代入式 (7.54) 即得式 (7.53). 证完.

推论四 若 $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$ 和 $(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta})$ 都是非零根, 则 $N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}\neq 0$.

推论五 除零根外, 沿根矢量 $\boldsymbol{\alpha}$ 方向的根只有 $\pm\boldsymbol{\alpha}$.

证明 设 $t\boldsymbol{\alpha}$ 是非零根, 则 $\Gamma(t\boldsymbol{\alpha}/\boldsymbol{\alpha})=2t$ 和 $\Gamma\left(\boldsymbol{\alpha}/(t\boldsymbol{\alpha})\right)=2/t$ 都是整数, 解得 $t=\pm1$, ±2 或 $\pm1/2$. 因 $N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha}}=0$, 故 $\pm2\boldsymbol{\alpha}$ 不是根. 因此 $\pm\boldsymbol{\alpha}/2$ 也不能是根, 否则得出 $\boldsymbol{\alpha}=2(\boldsymbol{\alpha}/2)$ 不是根, 矛盾.

五、正根和素根

对复的半单李代数, $\det(g_{jk})\neq 0$, 可通过选择参数, 将 H_j 做适当的线性组合, 使

$$\langle H_j|H_k\rangle = -g_{jk} = \delta_{jk} \tag{7.56}$$

在保持 $-g_{jk}$ 不变的条件下, H_j 还允许做任意正交变换. H_j 做正交变换也就是根做正交变换. 附录 23 将证明, 可以找到适当的正交变换, 使所有根都变成实根. 既然根空间的度规是 $-g_{jk}=\delta_{jk}$, 实的根空间就是实欧几里得空间.

对于选定的嘉当基 H_j 的排列, 如果实根矢量 $\boldsymbol{\alpha}$ 的第一个不为零的分量大于零, 则称 $\boldsymbol{\alpha}$ 为正根, 小于零则称为负根. 如果一个正根不能表为其他正根的非负整数线性组合, 则称为素根 (simple root). 因此, 任何正根都能表为素根的非负整数线性组合, 任何负根都能表为素根的非正整数线性组合. 因为 ℓ 秩半单李代数的根矢量张开 ℓ 维空间, 所以素根数目不少于 ℓ. 下面定理证明素根是线性无关的, 素根数目等于 ℓ.

定理四 不同素根之差不是根, 它们的内积不大于零, ℓ 秩半单李代数的素根数目等于 ℓ.

证明 首先用反证法证明素根之差不是根. 设 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 是素根, $\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\gamma}$ 是根. 若 $\boldsymbol{\gamma}$ 是正根, 则 $\boldsymbol{\alpha}$ 可表为两个正根之和, 若 $\boldsymbol{\gamma}$ 是负根, 则 $\boldsymbol{\beta}$ 可表为两个正根之和, 都与假设矛盾. 其次由定理三可证素根的内积不大于零

$$\Gamma\left(\boldsymbol{\alpha}/\boldsymbol{\beta}\right) = \frac{2\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\beta}}{\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\beta}} = q-p = -p \leqslant 0$$

最后用反证法证明素根线性无关. 设素根存在实线性关系, 按照组合系数的正负, 把这组合中的素根分成两部分：一部分记作 $\boldsymbol{\alpha}^{(j)}$, 另一部分记作 $\boldsymbol{\beta}^{(k)}$, 则线性关系可表为

$$\boldsymbol{V}=\sum_j c_j\boldsymbol{\alpha}^{(j)}=\sum_k d_k\boldsymbol{\beta}^{(k)}\neq 0\ , \qquad c_j>0\ , \qquad d_k>0$$

既然 $\boldsymbol{\alpha}^{(j)}\neq\boldsymbol{\beta}^{(k)}$, 非零实矢量 $\boldsymbol{V}$ 的模为

$$\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{V}=\sum_{jk} c_jd_k\boldsymbol{\alpha}^{(j)}\cdot\boldsymbol{\beta}^{(k)}\leqslant 0$$

这与定理三推论二矛盾. 证完.

今后, 我们把素根记作 $\boldsymbol{r}_\mu$, 它的第 k 个分量记作 $(r_\mu)_k$. 若正根 $\boldsymbol{\alpha}$ 表为

$$\boldsymbol{\alpha}=\sum_{\mu=1}^{\ell} C_\mu\boldsymbol{r}_\mu\ , \qquad C=\sum_{\mu=1}^{\ell}C_\mu=\ \text{正整数} \tag{7.57}$$

则 C 称为正根 $\boldsymbol{\alpha}$ 的级数. 为了对半单李代数的嘉当 - 外尔基和根矢量有一个直观的了解, 附录 24 计算了 SU(3) 群的李代数.

附录 23 还证明下面定理.

定理五　准确到同构, 半单李代数有且仅有一个紧致实形.

推论一　半单李代数的有限维表示是完全可约的, 即可约表示可通过相似变换化为不可约表示的直和.

推论二　半单李代数可以分解为若干个非阿贝尔单纯李代数的直和.

因此, 半单李代数的分类问题, 归结为高于一维的单纯李代数的分类问题. 下节将在紧致实形中讨论高于一维的单纯李代数的分类.

7.3　单纯李代数的分类

在李代数的紧致实形里, 研究高于一维的单纯李代数分类问题. 现在根空间是实欧几里得空间, 矢量乘积满足欧几里得几何的全部规则. 一维的单纯李代数是阿贝尔李代数, 不是半单李代数, 这里不讨论.

一、素根夹角与模的关系

两素根内积不大于零, 因而夹角不小于 $\pi/2$. 两素根夹角的余弦平方的 4 倍为

$$4\cos^2\theta=4\ \frac{(\boldsymbol{r}_\mu\cdot\boldsymbol{r}_\nu)^2}{|\boldsymbol{r}_\mu|^2\ |\boldsymbol{r}_\nu|^2}=\frac{2\boldsymbol{r}_\mu\cdot\boldsymbol{r}_\nu}{|\boldsymbol{r}_\nu|^2}\ \frac{2\boldsymbol{r}_\nu\cdot\boldsymbol{r}_\mu}{|\boldsymbol{r}_\mu|^2}=\Gamma(\boldsymbol{r}_\mu/\boldsymbol{r}_\nu)\ \Gamma(\boldsymbol{r}_\nu/\boldsymbol{r}_\mu) \tag{7.58}$$

按照定理三, 等式右面是整数, 这就对素根的夹角给出了很大的限制, 而且这限制与素根长度比有关. 不失普遍性, 设素根 $\boldsymbol{r}_\mu$ 的长度不小于素根 $\boldsymbol{r}_\nu$ 的长度, 它们长度平方比为

$$\frac{|\boldsymbol{r}_\mu|^2}{|\boldsymbol{r}_\nu|^2}=\frac{\Gamma\left(\boldsymbol{r}_\mu/\boldsymbol{r}_\nu\right)}{\Gamma\left(\boldsymbol{r}_\nu/\boldsymbol{r}_\mu\right)}\geqslant 1 \tag{7.59}$$

满足 $4\cos^2\theta$ 等于整数的解只有四种, 列于表 7.1.

表 7.1 素根夹角与素根长度比的关系

θ	$\cos^2\theta$	$\Gamma(\boldsymbol{r}_\mu/\boldsymbol{r}_\nu)$	$\Gamma(\boldsymbol{r}_\nu/\boldsymbol{r}_\mu)$	$\lvert\boldsymbol{r}_\mu\rvert/\lvert\boldsymbol{r}_\nu\rvert$
$5\pi/6=150^\circ$	3/4	−3	−1	$\sqrt{3}$
$3\pi/4=135^\circ$	1/2	−2	−1	$\sqrt{2}$
$2\pi/3=120^\circ$	1/4	−1	−1	1
$\pi/2=90^\circ$	0	0	0	任意

二、邓金图

邓金 (Dynkin) 图是按照下述规则画出来的单纯李代数的素根图:

(1) 以后会看到, 一个单纯李代数中, 素根最多有两种不同的长度. 把长的素根用空心圈表示, 短的素根用实心圈表示, 如果素根一样长, 通常都用空心圈表示. 为方便起见, 我们常把描写素根的圈直接叫成素根.

(2) 夹角为 $2\pi/3$ 的两素根长度相等, 相应的圈用单线连接. 夹角为 $3\pi/4$ 的两素根长度比为 $\sqrt{2}$, 相应的圈用双线连接. 夹角为 $5\pi/6$ 的两素根长度比为 $\sqrt{3}$, 相应的圈用三线连接. 夹角为 $\pi/2$ 的两素根长度比无限制, 相应的圈不用线连接. 因此式 (7.58) 右面的数值刚好等于这两个素根 (对应圈) 的连线数.

下一小节将用简单的代数方法证明, 高于一维的单纯李代数共有四个李代数系列: A_ℓ, B_ℓ, C_ℓ 和 D_ℓ, 它们称为典型 (classical) 李代数, 还有五个例外 (exceptional) 李代数: G_2, F_4, E_6, E_7 和 E_8. 它们的邓金图见图 7.1.

下一节将介绍, $\mathrm{SU}(\ell+1)$ 群的李代数是 A_ℓ, $\mathrm{SO}(2\ell+1)$ 群的李代数是 B_ℓ, $\mathrm{SO}(2\ell)$ 群的李代数是 D_ℓ, 酉辛群 $\mathrm{USp}(2\ell)$ 的李代数是 C_ℓ. 从图 7.1 还可以看到, 下面各对李代数的邓金图分别是相同的, 因而它们同构, 对应的李群局域同构

$$\begin{aligned}
&\mathrm{B}_1\approx\mathrm{A}_1\approx\mathrm{C}_1\ , && \mathrm{SO}(3)\sim\mathrm{SU}(2)\approx\mathrm{USp}(2)\\
&\mathrm{B}_2\approx\mathrm{C}_2\ , && \mathrm{SO}(5)\sim\mathrm{USp}(4)\\
&\mathrm{D}_2\approx\mathrm{A}_1\oplus\mathrm{A}_1\ , && \mathrm{SO}(4)\sim\mathrm{SU}(2)\otimes\mathrm{SU}(2)'\\
&\mathrm{D}_3\approx\mathrm{A}_3 && \mathrm{SO}(6)\sim\mathrm{SU}(4)
\end{aligned} \tag{7.60}$$

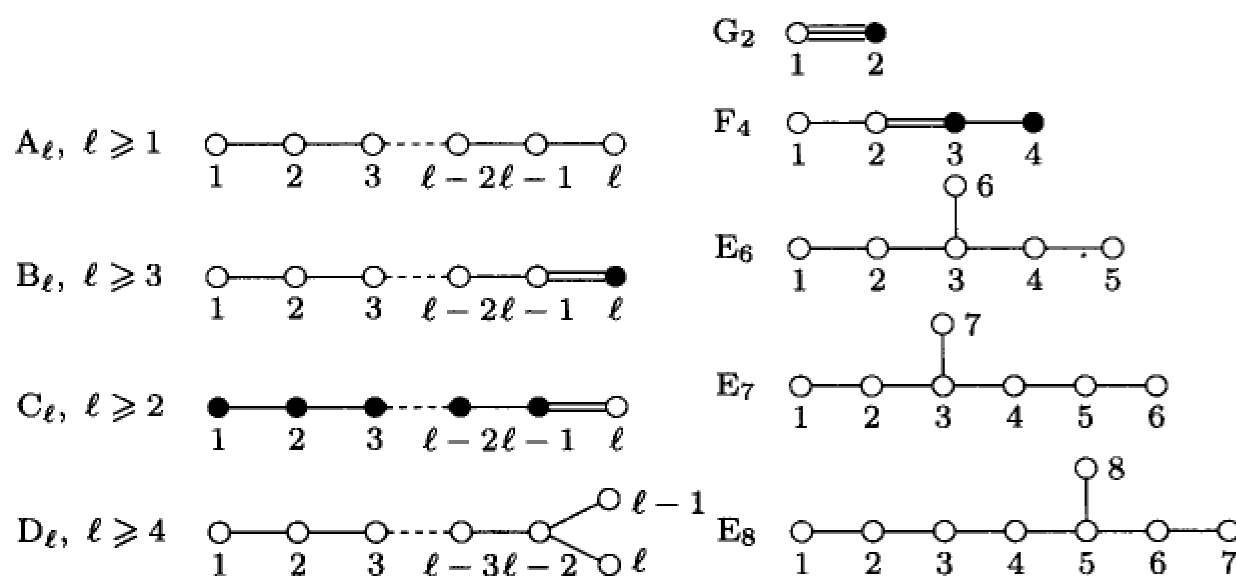


图 7.1 单纯李代数的邓金图

对一个单纯李代数, 如果所有生成元乘一个公共实因子 λ, 则结构常数和根矢量都扩大 λ 倍, 基林型就扩大 λ^2 倍. 这样做并不改变结构常数关于指标的完全反对称性, 不改变基林型的负定性, 不改变实李代数的单纯性和紧致性, 也不改变根矢量内积的定义式 (7.44), 但内积不再按欧几里得几何的规则等于根矢量分量的平方和. 通常文献中, 在基林型是负常数矩阵的条件下, 放弃内积定义式 (7.44), 改用欧几里得几何的规则, 即不再用基林型作为升降指标的度规张量, 把协变指标和逆变指标看成相同的, 根矢量的内积就等于根矢量分量的平方和. 这样的重新定义并不改变嘉当 – 外尔基的正则对易关系式 (7.42), 当然其中 $N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}$ 的取值扩大了 λ 倍. 引入符号

$$d_\mu = \frac{1}{2}\,\boldsymbol{r}_\mu \cdot \boldsymbol{r}_\mu \tag{7.61}$$

调节可乘因子 λ, 使单纯李代数较长根的 d_μ 等于 1.

* 三、单纯李代数的邓金图

下面讨论单纯李代数邓金图的性质和可能存在哪些邓金图.

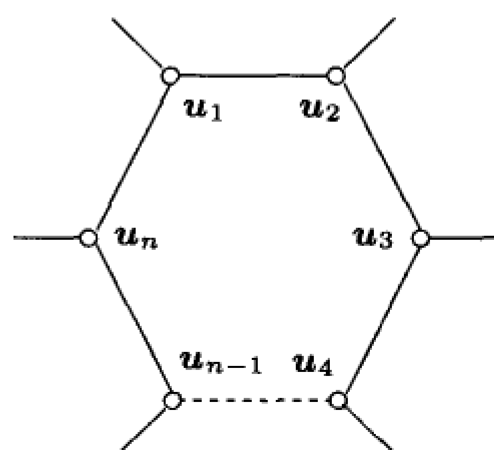
1. 单纯李代数的邓金图不会断开

如果邓金图断成两部分, 则分属两部分的素根间都互相正交. 按定理三, 素根正交时, $q-p=0$. 而定理四指出, 素根之差不是根, 因而现在分属两部分的素根和也不是根. 这样, 单纯李代数的生成元分成两部分, 与第一部分有关的生成元 $E_{\boldsymbol{r}}$ 和 $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{H}$, 和与第二部分有关的生成元 $E_{\boldsymbol{r}'}$ 和 $\boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{H}$ 互相之间都对易, 李代数分解为两理想的直和, 与李代数的单纯性矛盾.

2. 邓金图不含封闭环

用反证法. 设邓金图包含封闭环, 取最小的封闭环, 环上连线可以是单线、双线或三线, 环内再无其他连线. 图中不标出双线或三线, 也不用实心圈区分素根长短.

沿环上的素根顺序记作 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n$, 并设 $\boldsymbol{u}_{n+1} \equiv \boldsymbol{u}_1$, 其中 n 是环中所含素根数目. n 个素根之和是非零矢量



$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{a} &= \sum_{j=1}^{n} \boldsymbol{u}_j \neq 0 \\
|\boldsymbol{a}|^2 &= \sum_{j=1}^{n} |\boldsymbol{u}_j|^2 + 2\sum_{j=1}^{n} \boldsymbol{u}_j \cdot \boldsymbol{u}_{j+1} \\
&= \sum_{j=1}^{n} |\boldsymbol{u}_j|^2 \{1 + \Gamma(\boldsymbol{u}_{j+1}/\boldsymbol{u}_j)\} \leqslant 0
\end{aligned}
$$

与 $\boldsymbol{a}$ 是非零矢量矛盾.

3. 从每一个素根引出的连线数不超过三根

设素根 $\boldsymbol{r}$ 与 n 个素根 $\boldsymbol{u}_j$, $1 \leqslant j \leqslant n$, 相连, 连线数等于

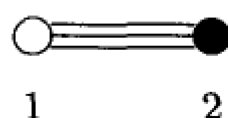
$$
\sum_{j=1}^{n} \Gamma(\boldsymbol{r}/\boldsymbol{u}_j)\, \Gamma(\boldsymbol{u}_j/\boldsymbol{r})
$$

由于不存在环, 这些素根 $\boldsymbol{u}_j$ 间再无连线, 即它们互相正交. 既然素根线性无关, $\boldsymbol{r}$ 的长度平方一定大于它在各 $\boldsymbol{u}_j$ 方向的分量平方和

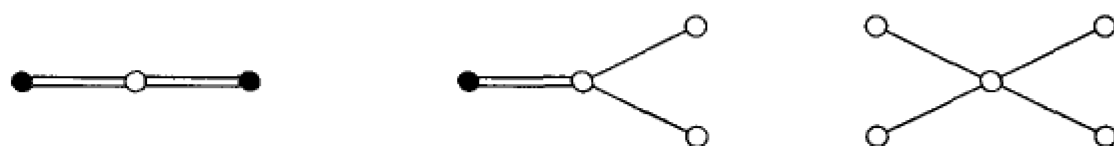
$$
|\boldsymbol{r}|^2 > \sum_{j=1}^{n} (\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{u}_j)^2 / |\boldsymbol{u}_j|^2 = \frac{|\boldsymbol{r}|^2}{4} \sum_{j=1}^{n} \Gamma(\boldsymbol{r}/\boldsymbol{u}_j)\, \Gamma(\boldsymbol{u}_j/\boldsymbol{r})
$$

消去 $|\boldsymbol{r}|^2$ 后, 即得连线数小于 4. 证完.

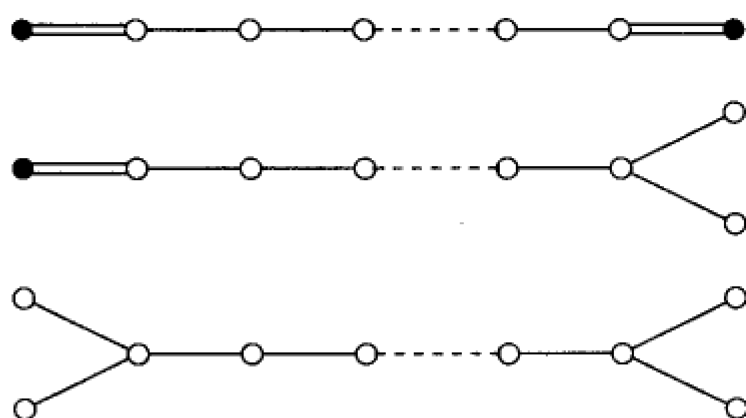
由此, 包含三线的邓金图只有一种:



称为 G_2 李代数. 并且下列图都是不允许的:



在上面图中把空心圈和实心圈交换, 同样也是不允许的. 下面将证明, 在上面图中, 把中间的圈换成一段用单线相连的素根圈链, 得到的下图也是不允许的:



设中间插入的素根为 m 个 $\boldsymbol{v}_j$, $1 \leqslant j \leqslant m$, 它们的长度相等, 记作 v. 这 m 个素根之和 $\boldsymbol{v} = \sum_j \boldsymbol{v}_j$ 的长度仍是 v

$$|\boldsymbol{v}|^2 = \sum_{j=1}^{m} |\boldsymbol{v}_j|^2 + 2\sum_{j=1}^{m-1} \boldsymbol{v}_j \cdot \boldsymbol{v}_{j+1} = mv^2 - (m-1)v^2 = v^2$$

用这个 $\boldsymbol{v}$ 代替前面的 $\boldsymbol{r}$, 同样可证明, 这 m 个素根组与其他素根的连线数小于 4.

4. 带有双线的邓金图

根据上面分析, 带有双线的邓金图只能取如下形式:



其中, $\boldsymbol{v}_k$ 的长度为 v, $\boldsymbol{u}_j$ 的长度为 $\sqrt{2}v$. 令

$$\boldsymbol{u} = \sum_{j=1}^{n} j\boldsymbol{u}_j \;, \qquad \boldsymbol{v} = \sum_{k=1}^{m} k\boldsymbol{u}_k \tag{7.62}$$

则

$$\begin{aligned}
|\boldsymbol{v}|^2 &= \sum_{k=1}^{m} k^2v^2 + \sum_{k=1}^{m-1} k(k+1)\left(-v^2\right) \\
&= v^2 \left(m^2 - \sum_{k=1}^{m-1} k\right) = \frac{1}{2}m(m+1)v^2, \\
|\boldsymbol{u}|^2 &= n(n+1)v^2
\end{aligned} \tag{7.63}$$

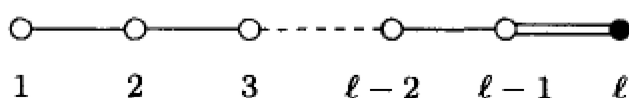
由于 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 不共线, 根据许瓦兹 (Schwarz) 不等式, 有

$$\begin{aligned}
0 &< |\boldsymbol{u}|^2|\boldsymbol{v}|^2 - (\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{v})^2 \\
&= \frac{1}{2}n(n+1)m(m+1)v^4 - (mn)^2\left(\boldsymbol{u}_n \cdot \boldsymbol{v}_m\right)^2 \\
&= \frac{1}{2}nm\left(n+m+1-mn\right)v^4
\end{aligned}$$

即

$$(m-1)(n-1)<2$$

若 $m=1$, 则 n 可取任意正整数, 设为 $\ell-1$, 则得如下邓金图:



称为 B_ℓ 李代数. 若 $n=1$, 则 m 可取任意正整数 $\ell-1$, 得如下邓金图:



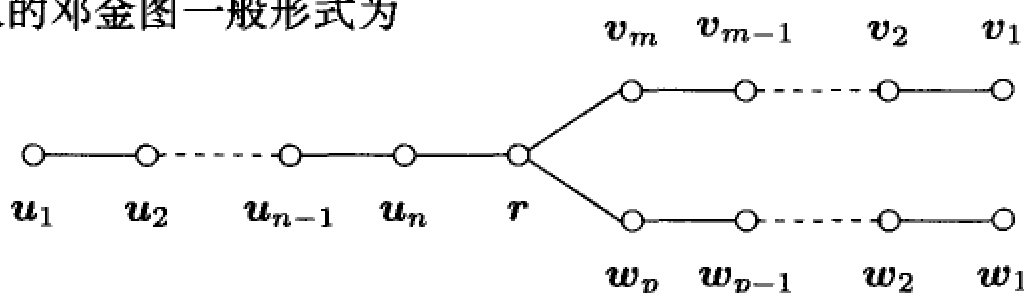
称为 C_ℓ 李代数. 若 $n=m=2$, 则邓金图为:



称为 F_4 李代数.

5. 带有分叉的邓金图

带有分叉的邓金图一般形式为



所有素根长度相等, 记作 v. 令

$$\boldsymbol{u}=\sum_{j=1}^{n} j\boldsymbol{u}_j\ ,\qquad \boldsymbol{v}=\sum_{k=1}^{m} k\boldsymbol{v}_k\ ,\qquad \boldsymbol{w}=\sum_{s=1}^{p} s\boldsymbol{w}_s$$

它们互相正交, 且与 $\boldsymbol{r}$ 线性无关

$$v^2=|\boldsymbol{r}|^2>\frac{(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{u})^2}{|\boldsymbol{u}|^2}+\frac{(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{v})^2}{|\boldsymbol{v}|^2}+\frac{(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{w})^2}{|\boldsymbol{w}|^2}$$

由式 (7.63), 得

$$\frac{(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{u})^2}{|\boldsymbol{u}|^2}=\frac{n^2v^4/4}{n(n+1)v^2/2}=\frac{nv^2}{2(n+1)}=\frac{v^2}{2}-\frac{v^2}{2(n+1)}$$

故

$$\frac{3}{2}-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{n+1}+\frac{1}{m+1}+\frac{1}{p+1}\right)<1,$$

$$\frac{1}{n+1}+\frac{1}{m+1}+\frac{1}{p+1}>1$$

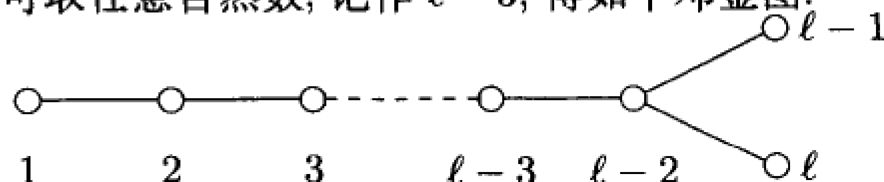
不失普遍性, 设 $p \leqslant m \leqslant n$, 则把上式左面三项全用最大的项代替, 不等式仍成立

$$\frac{3}{p+1} > 1\,, \qquad \text{得} \;\; p = 1$$

消去与 p 有关的项后, 再用 m 代替 n, 得

$$\frac{2}{m+1} > \frac{1}{2}\,, \qquad \text{得} \;\; m = 1 \;\; \text{或} \;\; 2$$

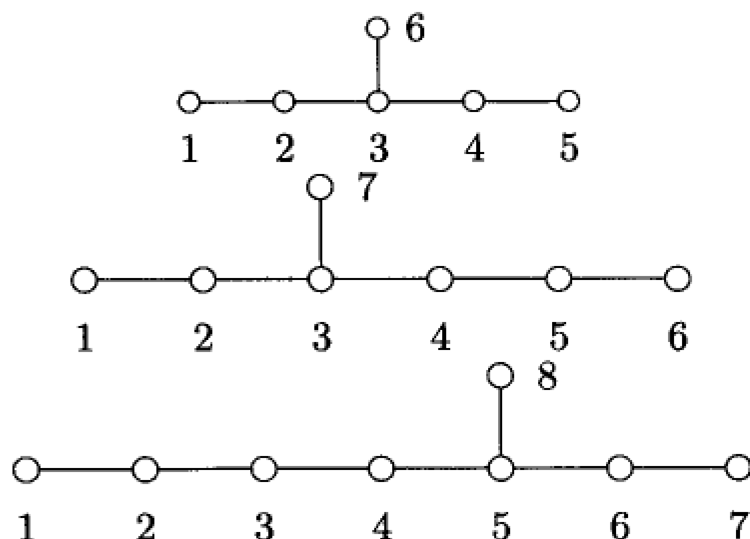
若 $m = p = 1$, 则 n 可取任意自然数, 记作 $\ell - 3$, 得如下邓金图:



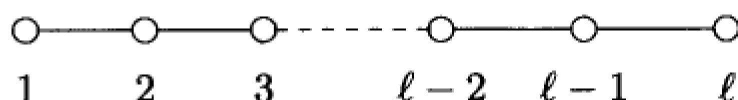
称为 D_ℓ 李代数. 若 $p = 1$ 和 $m = 2$, 则

$$\frac{1}{n+1} > \frac{1}{6}\,, \qquad \text{得} \;\; 2 \leqslant n < 5$$

有三个邓金图, 分别称为 E_6, E_7 和 E_8 李代数:



6. 全是单线的邓金图, 称为 A_ℓ 李代数:



最后得到图 7.1 给出的全部单纯李代数的邓金图.

四、嘉当矩阵

ℓ 秩的单纯李代数有 ℓ 个素根 $\boldsymbol{r}_\mu$, 定义 ℓ 维矩阵 A

$$A_{\mu\nu} = \Gamma\left(\boldsymbol{r}_\nu/\boldsymbol{r}_\mu\right) = \frac{2\boldsymbol{r}_\nu \cdot \boldsymbol{r}_\mu}{|\boldsymbol{r}_\mu|^2} = d_\mu^{-1}\;\left(\boldsymbol{r}_\nu \cdot \boldsymbol{r}_\mu\right) \tag{7.64}$$

它的对角元总是 2, 非对角元可取 0, −1, −2 和 −3. 这样构成的 ℓ 维矩阵称为嘉当矩阵. 与邓金图相比, 当素根 $\boldsymbol{r}_\mu$ 和 $\boldsymbol{r}_\nu$ 没有线相连时, $A_{\mu\nu} = A_{\nu\mu} = 0$, 当它们有线

相连时, 若 $\boldsymbol{r}_\mu$ 的长度不小于 $\boldsymbol{r}_\nu$, 则 $A_{\mu\nu}=-1$, 而 $A_{\nu\mu}=-n$, 其中 n 是连线数. 当素根的排列次序选定后, 嘉当矩阵与邓金图有一一对应关系, 它们是描写单纯李代数的两种等价方法.

邓金图和嘉当矩阵给出了该李代数的全部信息, 它们不仅给出单纯李代数素根的夹角和长度比, 而且由它们可计算出该李代数的全部根矢量. 附录 25 中介绍了根矢量的计算方法, 并用 G_2 李代数为例做了具体计算. 但应该指出, 根矢量有许多计算方法, 所有单纯李代数的根矢量早已有人计算过, 并列表给出. 用邓金图和嘉当矩阵计算单纯李代数的全部根矢量, 是为了说明它们确给出了单纯李代数的全部信息.

*7.4 几类典型的单纯李群

一、SU(N) 群及其李代数

所有 $N\times N$ 幺模幺正矩阵 u 的集合

$$u^\dagger u=\mathbf{1}\ , \qquad \det u=1 \tag{7.65}$$

按照矩阵乘积规则, 满足群的四个条件, 因而构成群, 称为 N 维特殊幺正矩阵群, 记作 SU(N) 群. U 代表幺正, S 代表幺模, 即矩阵行列式为 1. 一个 N 维复矩阵, 包含 $2N^2$ 个实参数. 幺正矩阵的列矩阵互相正交归一. 归一化条件给出 N 个实条件. 正交条件给出 $N(N-1)/2$ 个复条件, 即 $N(N-1)$ 个实条件. 行列式为 1 又给出一个实条件. 因此描写 SU(N) 群元素的独立实参数数目为

$$g=2N^2-N-N(N-1)-1=N^2-1$$

即 SU(N) 群的阶数 g 是 N^2-1. 幺正条件限制了矩阵元素的模有限, 而且参数变化区域是连通的, 因而 SU(N) 群是紧致简单李群.

常用下面方法选择 SU(N) 群的群参数. 幺正矩阵 u 可通过幺模幺正相似变换 X 对角化, 对角元的模为 1. 把对角元取为 $\exp(-\mathrm{i}\varphi_a)$, 其中相角 φ_a 允许改变 2π 的整数倍. 由于 u 的行列式为 1, N 个相角之和是 2π 的整数倍, 可选为零. 规定 φ_a 的取值范围为

$$\varphi_N=-\sum_{a=1}^{N-1}\varphi_a\ , \qquad -\pi\leqslant\varphi_a\leqslant\pi\ , \qquad 1\leqslant a\leqslant(N-1) \tag{7.66}$$

因此

$$\begin{aligned} u &= X\exp\{-\mathrm{i}\Phi\}X^{-1} \\ &= \exp(-\mathrm{i}H)\ , \\ H &= X\Phi X^{-1}, \end{aligned} \qquad \Phi = \begin{pmatrix} \varphi_1 & & & \\ & \varphi_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \varphi_N \end{pmatrix} \tag{7.67}$$

H 是无迹厄米矩阵, 共含 N^2-1 个独立实参数, 可用它们作为 SU(N) 群的群参数, 描写群元素 u. 因为 X 矩阵也是 SU(N) 群的元素, 式 (7.67) 表明, SU(N) 群任意元素 u 都与取对角矩阵的群元素共轭, SU(N) 群的类由式 (7.66) 的 $N-1$ 个参数 φ_a 描写. 数学家证明了 SU(N) 群类上的积分为

$$\begin{aligned} &\int \mathrm{d}\varphi W(\varphi)F(\varphi) = \int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\varphi_1\cdots\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\varphi_{N-1}\int\mathrm{d}\varphi_N\delta\left(\sum_{a=1}^{N}\varphi_a\right)W(\varphi)F(\varphi) \\ &W(\varphi) = \frac{1}{\Omega}\prod_{a<b}^{N}\sin^2\left(\frac{\varphi_a-\varphi_b}{2}\right), \\ &\Omega = \int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\varphi_1\cdots\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\varphi_{N-1}\int\mathrm{d}\varphi_N\delta\left(\sum_{a=1}^{N}\varphi_a\right)\prod_{a<b}^{N}\sin^{-2}\left(\frac{\varphi_a-\varphi_b}{2}\right) \end{aligned} \tag{7.68}$$

H 可按 N 维无迹厄米矩阵的基展开. 物理中常选如下三类 N 维无迹厄米矩阵作为基. 前两类矩阵基是泡利矩阵 σ_1 和 σ_2 的推广, 它们分别只包含两个非零的非对角元

$$\begin{aligned} \left(T_{ab}^{(1)}\right)_{cd} &= \frac{1}{2}\left(\delta_{ac}\delta_{bd}+\delta_{bc}\delta_{ad}\right), \\ \left(T_{ab}^{(2)}\right)_{cd} &= \frac{-\mathrm{i}}{2}\left(\delta_{ac}\delta_{bd}-\delta_{bc}\delta_{ad}\right), \end{aligned} \qquad a<b \tag{7.69}$$

其中, c 和 d 是矩阵的行列指标, a 和 b 是基的序指标, 它们都在 1 至 N 取值. 矩阵基 $T_{ab}^{(1)}$ 只有 a 行 b 列元素和 b 行 a 列元素不为零, 而为 1/2, 因而是对称矩阵, 而且对 a 和 b 交换也是对称的. 矩阵基 $T_{ab}^{(2)}$ 也只有 a 行 b 列元素和 b 行 a 列元素不为零, 分别为 $\mp\mathrm{i}/2$, 因而是反对称矩阵, 而且对 a 和 b 交换也是反对称的

$$\begin{aligned} \left(T_{ab}^{(1)}\right)_{cd} &= \left(T_{ba}^{(1)}\right)_{cd} = \left(T_{ab}^{(1)}\right)_{dc}, \\ \left(T_{ab}^{(2)}\right)_{cd} &= -\left(T_{ba}^{(2)}\right)_{cd} = -\left(T_{ab}^{(1)}\right)_{dc} \end{aligned} \tag{7.70}$$

为了保持基不重复, 限制 $a<b$. 这样的矩阵基共有 $N(N-1)$ 个. 作为无迹矩阵的基, $T_{ab}^{(1)}$ 的指标 a 和 b 必须不相等. 但作为一个对角矩阵的符号, $T_{aa}^{(1)}$ 以后会常用

$$\left(T_{aa}^{(1)}\right)_{cd} = \delta_{ac}\delta_{cd} \tag{7.71}$$

第三类矩阵基 $T_a^{(3)}$ 是泡利矩阵 σ_3 的推广，它是无迹对角矩阵，前面有 $a-1$ 个对角元是 1，第 a 个对角元是 $-(a-1)$，其余对角元是零. 和泡利矩阵一样，为了使矩阵平方的迹为 1/2，前面再乘归一化因子，得

$$\left(T_a^{(3)}\right)_{cd}=\begin{cases}\delta_{cd}\left\{2a(a-1)\right\}^{-1/2}, & \text{当 } c<a,\\ -\delta_{cd}\left\{(a-1)/(2a)\right\}^{1/2}, & \text{当 } c=a,\\ 0, & \text{当 } c>a,\end{cases}\qquad 2\leqslant a\leqslant N \tag{7.72}$$

这对角的矩阵基有 $N-1$ 个. 合起来是 N^2-1 个矩阵基，构成 N 维无迹厄米矩阵的完备基. 前两类基的形式比较清楚，就是一个扩大了的泡利矩阵. 为了对第三类矩阵基有一个直观的了解，下面列出几个 $T_a^{(3)}$ 矩阵. diag 代表对角矩阵，只列出它们的对角元素

$$\begin{aligned}
T_2^{(3)}&=\text{diag}\left(1,\ -1,\ 0,\ \cdots,0\right\}/2,\\
T_3^{(3)}&=\text{diag}\left(1,\ 1,\ -2,\ 0,\ \cdots,0\right\}/(2\sqrt{3}),\\
T_4^{(3)}&=\text{diag}\left(1,\ 1,\ 1,\ -3,\ 0,\ \cdots,0\right\}/(2\sqrt{6}),\\
T_a^{(3)}&=\text{diag}\left(1,\ \cdots,\ 1,\ -(a-1),\ 0,\ \cdots,0\right\}/\sqrt{2a(a-1)}
\end{aligned}\tag{7.73}$$

任何无迹厄米矩阵都可按这组完备基展开，展开系数是实数. 矩阵 H 的展开系数通常取为 $\omega_{ab}^{(1)}$, $\omega_{ab}^{(2)}$ 和 $\omega_a^{(3)}$，它们就是 SU(N) 群的群参数，共 N^2-1 个独立实参数

$$H=\sum_{a<b}\left\{\omega_{ab}^{(1)}T_{ab}^{(1)}+\omega_{ab}^{(2)}T_{ab}^{(2)}\right\}+\sum_{a=2}^{N}\omega_a^{(3)}T_a^{(3)}\ ,\qquad u=\exp\left(-\text{i}H\right) \tag{7.74}$$

SU(N) 群的群空间具体形式比较复杂，但这种指数形式使群参数出现周期性，可以限制群参数在有限的闭区域内变化.

物理上常用一个统一的编号来编排三类矩阵基. 编号按 "列指标" b 增加的次序自 2 开始编排，对每一确定的 b，按 "行指标" a 增加的次序自 1 开始编排，对确定的 b 和 a，按一，二，三类矩阵基的次序编排. 具体说

$$\begin{aligned}
&T_1=T_{12}^{(1)}\ ,\quad T_2=T_{12}^{(2)}\ ,\quad T_3=T_2^{(3)}\ ,\quad T_4=T_{13}^{(1)}\ ,\quad T_5=T_{13}^{(2)},\\
&T_6=T_{23}^{(1)}\ ,\quad T_7=T_{23}^{(2)}\ ,\quad T_8=T_3^{(3)}\ ,\quad T_9=T_{14}^{(1)}\ ,\quad T_{10}=T_{14}^{(2)},\\
&T_{11}=T_{24}^{(1)}\ ,\quad T_{12}=T_{24}^{(2)}\ ,\quad T_{13}=T_{34}^{(1)}\ ,\quad T_{14}=T_{34}^{(2)}\ ,\quad T_{15}=T_4^{(3)},\\
&\cdots
\end{aligned}\tag{7.75}$$

以此类推. 这组矩阵基满足下述正交归一条件

$$\mathrm{Tr}\,(T_A T_B) = \frac{1}{2}\delta_{AB}\ , \qquad A,\ B \leqslant (N^2-1) \tag{7.76}$$

$N=2$ 时它们就是泡利矩阵. $N=3$ 时, 它们称为盖尔曼 (Gell-Mann) 矩阵, 如附录 24 式 (A24.2) 所示. 很明显, 当参数比较小时, u 矩阵按参数展开, 生成元正是这组矩阵基 T_A. 生成元也可直接用幺模和幺正条件来确定. 设在恒元附近

$$\begin{aligned} &u = \mathbf{1} - \mathrm{i}\alpha X\ , && u^\dagger = \mathbf{1} + \mathrm{i}\alpha X^\dagger, \\ &u^\dagger u = \mathbf{1} - \mathrm{i}\alpha\left(X - X^\dagger\right) = \mathbf{1}\ , && \det\ u = 1 - \mathrm{i}\alpha\mathrm{Tr}\ X = 1 \end{aligned} \tag{7.77}$$

因此 αX 正是无迹厄米矩阵 H, 按式 (7.74) 展开后, 生成元是 T_A.

生成元满足的正交归一条件 (7.76) 保证了结构常数 $C_{AB}^{\ \ D}$ 对三个指标完全反对称. 事实上, 由李氏第二定理, 生成元 T_A 满足对易关系式 (7.5). 乘生成元 T_D 并取迹, 应用式 (7.76) 得

$$C_{AB}^{\ \ D} = -2\mathrm{i}\mathrm{Tr}\left\{T_A T_B T_D - T_B T_A T_D\right\} \tag{7.78}$$

这表明 SU(N) 群是紧致李群. 也只有紧致李群才能选择参数, 使生成元满足正交归一关系. 在文献中, 经常把这完全反对称的结构常数记作 f_{ABD}. 为了把对易关系写成统一的形式, 常引入式 (7.71) 给出的 N 个有迹对角矩阵 $T_{aa}^{(1)}$ 作为过渡, 但要注意 $T_{aa}^{(1)}$ 不是生成元

$$\begin{aligned} T_a^{(3)} &= \left(\frac{1}{2a(a-1)}\right)^{1/2}\left\{\sum_{b=1}^{a-1} T_{bb}^{(1)} - (a-1)T_{aa}^{(1)}\right\}, \\ T_{11}^{(1)} - T_{aa}^{(1)} &= \sum_{b=2}^{a-1}\left(\frac{2}{b(b-1)}\right)^{1/2} T_b^{(3)} + \left(\frac{2a}{a-1}\right)^{1/2} T_a^{(3)} \end{aligned} \tag{7.79}$$

直接验算可知, 这组矩阵基满足如下对易关系

$$\begin{aligned} \left[T_{ab}^{(1)},\ T_{cd}^{(1)}\right] &= \frac{\mathrm{i}}{2}\left(\delta_{bc}T_{ad}^{(2)} + \delta_{ad}T_{bc}^{(2)} + \delta_{ac}T_{bd}^{(2)} + \delta_{bd}T_{ac}^{(2)}\right), \\ \left[T_{ab}^{(2)},\ T_{cd}^{(2)}\right] &= \frac{-\mathrm{i}}{2}\left(\delta_{bc}T_{ad}^{(2)} + \delta_{ad}T_{bc}^{(2)} - \delta_{ac}T_{bd}^{(2)} - \delta_{bd}T_{ac}^{(2)}\right), \\ \left[T_{ab}^{(1)},\ T_{cd}^{(2)}\right] &= \frac{-\mathrm{i}}{2}\left(\delta_{bc}T_{ad}^{(1)} - \delta_{ad}T_{bc}^{(1)} + \delta_{ac}T_{bd}^{(1)} - \delta_{bd}T_{ac}^{(1)}\right) \end{aligned} \tag{7.80}$$

$$
\begin{aligned}
&\left[T_a^{(3)},\ T_{ab}^{(1)}\right] = -\mathrm{i}\left\{(a-1)/(2a)\right\}^{1/2} T_{ab}^{(2)}\ , \\
&\left[T_a^{(3)},\ T_{ab}^{(2)}\right] = \mathrm{i}\left\{(a-1)/(2a)\right\}^{1/2} T_{ab}^{(1)}\ , \\
&\left[T_c^{(3)},\ T_{ab}^{(1)}\right] = \mathrm{i}\left\{2c(c-1)\right\}^{-1/2} T_{ab}^{(2)}\ , \\
&\left[T_c^{(3)},\ T_{ab}^{(2)}\right] = -\mathrm{i}\left\{2c(c-1)\right\}^{-1/2} T_{ab}^{(1)}\ , \qquad\qquad a<c<b \\
&\left[T_b^{(3)},\ T_{ab}^{(1)}\right] = \mathrm{i}\left\{b/(2b-2)\right\}^{1/2} T_{ab}^{(2)}\ , \\
&\left[T_b^{(3)},\ T_{ab}^{(2)}\right] = -\mathrm{i}\left\{b/(2b-2)\right\}^{1/2} T_{ab}^{(1)}\ , \\
&\left[T_a^{(3)},\ T_b^{(3)}\right] = \left[T_b^{(3)},\ T_{ac}^{(1)}\right] = \left[T_a^{(3)},\ T_{cb}^{(1)}\right] \\
&\qquad = \left[T_b^{(3)},\ T_{ac}^{(2)}\right] = \left[T_a^{(3)},\ T_{cb}^{(2)}\right] = 0\ ,
\end{aligned}
\tag{7.81}
$$

(7.80) 第三个等式右边出现的四个第一类矩阵基, 如果下标相同, 要用式 (7.79) 换成第三类矩阵基. 写式 (7.80) 时应充分利用对称性式 (7.70), 实际上, 后三项可由第一项由对称性推得. 第三类矩阵基是对角矩阵, 它们互相对易. 式 (7.80) 和 (7.81) 是 SU(N) 群生成元满足的共同对易关系. 附录 26 列出 SU(N) 群自身表示生成元满足的反对易关系和 SU(3) 群的结构常数.

SU(N) 群中包含 N 个常数矩阵

$$
T_m = \omega^m \mathbf{1}\ , \qquad \omega = \exp\{-\mathrm{i}2\pi/N\}\ , \qquad 0 \leqslant m \leqslant (N-1) \tag{7.82}
$$

它们可与 SU(N) 群所有元素对易. 它们的集合称为 SU(N) 群的中心, 记作 Z_N. Z_N 是 SU(N) 群的不变子群, 商群 SU(N)/Z_N 的群空间是 N 度连通的, SU(N) 群是它的覆盖群.

在 SU(N) 群自身表示的生成元中, $N-1$ 个对角生成元 $T_a^{(3)}$ 互相对易, 构成 SU(N) 群对应李代数的嘉当子代数. 为了以后的方便, 通常颠倒排列次序, 定义

$$
H_j = \sqrt{2} T_{N-j+1}^{(3)}, \qquad j = 1,\ 2,\ \cdots,\ \ell, \qquad \ell \equiv N-1 \tag{7.83}
$$

乘 $\sqrt{2}$ 是为了使素根半长度 $d_\mu = 1$. 余下的生成元要组合成 H_j 的共同本征矢量, 按归一化条件, 取

$$
E_{\pm\boldsymbol{\alpha}_{ab}} = T_{ab}^{(1)} \pm \mathrm{i}T_{ab}^{(2)}, \qquad a<b \tag{7.84}
$$

得

$$
[H_j,\ E_{\boldsymbol{\alpha}_{ab}}] = \begin{cases}
-\left[(N-j)/(N-j+1)\right]^{1/2} E_{\boldsymbol{\alpha}_{ab}}, & N-j+1=a \\
\left[(N-j+1)(N-j)\right]^{-1/2} E_{\boldsymbol{\alpha}_{ab}}, & a<N-j+1<b \\
\left[(N-j+1)/(N-j)\right]^{1/2} E_{\boldsymbol{\alpha}_{ab}}, & N-j+1=b \\
0, & \text{其他}
\end{cases}
$$

为了把根矢量表达得更清楚, 在 ℓ 维根空间引进对称地分布的 $\ell+1$ 个线性相关的矢量 $\boldsymbol{V}_a$

$$
\begin{aligned}
&(\boldsymbol{V}_a)_j = \left(T^{(3)}_{N-j+1}\right)_{aa} = \sqrt{1/2}\,(H_j)_{aa}, \qquad 1 \leqslant j \leqslant \ell, \qquad 1 \leqslant a \leqslant N = \ell+1, \\
&\sqrt{2}\,(\boldsymbol{V}_a)_j = \begin{cases} [(N-j+1)(N-j)]^{-1/2}, & a < N-j+1 \\ -[(N-j)/(N-j+1)]^{1/2}, & a = N-j+1 \\ 0, & a > N-j+1 \end{cases} \\
&\sum_{a=1}^{\ell+1} \boldsymbol{V}_a = 0, \qquad \boldsymbol{V}_a \cdot \boldsymbol{V}_b = \frac{\delta_{ab}}{2} - \frac{1}{2(\ell+1)}
\end{aligned}
\tag{7.85}
$$

它们的具体形式是

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{V}_1 &= \left\{(2\ell(\ell+1))^{-1/2},\ (2(\ell-1)\ell)^{-1/2}, \cdots,\ (2a(a-1))^{-1/2}, \cdots,\ \sqrt{1/12},\ (1/2)\right\} \\
\boldsymbol{V}_2 &= \left\{(2\ell(\ell+1))^{-1/2},\ (2(\ell-1)\ell)^{-1/2}, \cdots,\ (2a(a-1))^{-1/2}, \cdots,\ \sqrt{1/12},\ (-1/2)\right\} \\
\boldsymbol{V}_3 &= \left\{(2\ell(\ell+1))^{-1/2},\ (2(\ell-1)\ell)^{-1/2}, \cdots,\ (2a(a-1))^{-1/2}, \cdots,\ -\sqrt{1/3},\ 0\right\} \\
&\cdots\cdots \\
\boldsymbol{V}_a &= \left\{(2\ell(\ell+1))^{-1/2},\ (2(\ell-1)\ell)^{-1/2}, \cdots,\ -((a-1)/2a)^{1/2},\ 0, \cdots,\ 0\right\} \\
&\cdots\cdots \\
\boldsymbol{V}_\ell &= \left\{(2\ell(\ell+1))^{-1/2},\ -((\ell-1)/(2\ell))^{1/2},\ 0,\ \cdots,\ 0\right\} \\
\boldsymbol{V}_{\ell+1} &= \left\{-(\ell/(2\ell+2))^{1/2},\ 0,\ \cdots,\ 0\right\}
\end{aligned}
$$

生成元 $E_{\boldsymbol{\alpha}_{ab}}$ 对应的正根就可简单地用矢量 $\boldsymbol{V}_a$ 表出

$$
\boldsymbol{\alpha}_{ab} = \sqrt{2}\,[\boldsymbol{V}_a - \boldsymbol{V}_b], \qquad a < b \tag{7.86}
$$

由此得 SU(N) 群的素根为

$$
\boldsymbol{r}_\mu = \sqrt{2}\,[\boldsymbol{V}_\mu - \boldsymbol{V}_{\mu+1}], \qquad 1 \leqslant \mu \leqslant \ell \tag{7.87}
$$

由式 (7.85) 可算得素根 $\boldsymbol{r}_\mu$ 的内积为

$$
\boldsymbol{r}_\mu \cdot \boldsymbol{r}_\nu = 2\delta_{\mu\nu} - \delta_{\mu(\nu-1)} - \delta_{\mu(\nu+1)} \tag{7.88}
$$

可见素根半长度 $d_\mu = 1$, 相邻素根夹角为 $2\pi/3$, 因而 SU($\ell+1$) 群的李代数是 A_ℓ.

所有正根 $\boldsymbol{\alpha}_{ab}$ 可表为素根的非负整数线性组合

$$\boldsymbol{\alpha}_{ab} = \sum_{\mu=a}^{b-1} \boldsymbol{r}_{\mu} \tag{7.89}$$

在一个单纯李代数中, 如果一个根与其他任一根之差的第一个非零分量总是正值, 则此根称为单纯李代数的最大根. 最大根在研究伴随表示时很重要. A_ℓ 李代数的最大根 $\boldsymbol{\omega}$ 为

$$\boldsymbol{\omega} = \sqrt{2}\left[\boldsymbol{V}_1 - \boldsymbol{V}_{\ell+1}\right] = \sum_{\mu=1}^{\ell} \boldsymbol{r}_{\mu} \tag{7.90}$$

二、SO(N) 群及其李代数

所有 $N \times N$ 实正交矩阵 R 的集合

$$R^T R = \mathbf{1}\ , \qquad R^* = R \tag{7.91}$$

按照矩阵乘积规则, 满足群的四个条件, 因而构成群, 称为 N 维实正交矩阵群, 记作 O(N) 群. 由式 (7.91) 得 $\det R = \pm 1$. O(N) 群是混合李群. O(N) 群中行列式为 1 的元素集合构成不变子群, 记作 SO(N) 群. O 代表实正交, S 代表幺模. 一个 N 维实矩阵, 包含 N^2 个实参数. 实正交矩阵的列矩阵互相正交归一, 给出 $N(N+1)/2$ 个实条件. 因此 SO(N) 群的阶数 g, 即描写 SO(N) 群元素 R 的独立实参数数目为

$$g = N^2 - N(N+1)/2 = N(N-1)/2 \tag{7.92}$$

SO(N) 群是 SU(N) 群的子群. 因为实矩阵的生成元是纯虚矩阵, 所以只要把 SU(N) 群元素的参数 $\omega_{ab}^{(1)}$ 和 $\omega_a^{(3)}$ 取为零, 就得到 SO(N) 群的元素. 习惯上, 取 $\omega_{ab} = \omega_{ab}^{(2)}/2$ 和 $T_{ab} = 2T_{ab}^{(2)}$, 得

$$R = \exp\{-\mathrm{i} \sum_{a<b=2}^{N} \omega_{ab} T_{ab}\}, \qquad (T_{ab})_{cd} = -\mathrm{i}\left(\delta_{ac}\delta_{bd} - \delta_{ad}\delta_{bc}\right) \tag{7.93}$$

$$\begin{aligned} &\mathrm{Tr}\left(T_{ab}T_{cd}\right) = 2\left(\delta_{ac}\delta_{bd} - \delta_{ad}\delta_{bc}\right) \\ &[T_{ab},\ T_{cd}] = -\mathrm{i}\left\{\delta_{bc}T_{ad} + \delta_{ad}T_{bc} - \delta_{bd}T_{ac} - \delta_{ac}T_{bd}\right\} \end{aligned} \tag{7.94}$$

生成元满足正交归一条件, 因而结构常数对三组指标完全反对称.

在 SO(N) 群自身表示的生成元中, 没有对角矩阵, 但根据生成元的对易关系式 (7.94), 只要两个生成元 T_{ab} 和 T_{cd} 的下标互不相等, 它们就互相对易. 由此可知, 在 SO(2ℓ) 群和 SO($2\ell+1$) 群中互相对易的生成元为 $T_{12}, T_{34}, \cdots, T_{(2\ell-1)(2\ell)}$. 取嘉当子代数的基 H_j 为

$$H_j = T_{(2j-1)(2j)}, \qquad 1 \leqslant j \leqslant \ell \tag{7.95}$$

余下的生成元要组合成 H_j 的共同本征矢量, 即 $[H_j,\ E_{\boldsymbol{\alpha}}] = \alpha_j E_{\boldsymbol{\alpha}}$. 对 SO(2ℓ) 群有

$$\begin{aligned}
E_{ab}^{(1)} &= \frac{1}{2}\left[T_{(2a)(2b-1)} - \mathrm{i}T_{(2a-1)(2b-1)} - \mathrm{i}T_{(2a)(2b)} - T_{(2a-1)(2b)}\right], \\
E_{ab}^{(2)} &= \frac{1}{2}\left[T_{(2a)(2b-1)} + \mathrm{i}T_{(2a-1)(2b-1)} + \mathrm{i}T_{(2a)(2b)} - T_{(2a-1)(2b)}\right], \\
E_{ab}^{(3)} &= \frac{1}{2}\left[T_{(2a)(2b-1)} - \mathrm{i}T_{(2a-1)(2b-1)} + \mathrm{i}T_{(2a)(2b)} + T_{(2a-1)(2b)}\right], \\
E_{ab}^{(4)} &= \frac{1}{2}\left[T_{(2a)(2b-1)} + \mathrm{i}T_{(2a-1)(2b-1)} - \mathrm{i}T_{(2a)(2b)} + T_{(2a-1)(2b)}\right],
\end{aligned} \qquad a < b \quad (7.96)$$

分别对应本征值 (根矢量) $\{\boldsymbol{e}_a - \boldsymbol{e}_b\}_j$, $\{-\boldsymbol{e}_a + \boldsymbol{e}_b\}_j$, $\{\boldsymbol{e}_a + \boldsymbol{e}_b\}_j$ 和 $\{-\boldsymbol{e}_a - \boldsymbol{e}_b\}_j$, 其中, $\{\boldsymbol{e}_a\}_j = \delta_{aj}$. 对 SO(2ℓ + 1) 群还要补充两组生成元

$$\begin{aligned}
E_{a}^{(5)} &= \sqrt{\frac{1}{2}}\left[T_{(2a)(2\ell+1)} - \mathrm{i}T_{(2a-1)(2\ell+1)}\right] \\
E_{a}^{(6)} &= \sqrt{\frac{1}{2}}\left[T_{(2a)(2\ell+1)} + \mathrm{i}T_{(2a-1)(2\ell+1)}\right]
\end{aligned} \qquad (7.97)$$

对应的本征值为 $\{\boldsymbol{e}_a\}_j$ 和 $-\{\boldsymbol{e}_a\}_j$. 这些根矢量中, 第一, 第三和第五组根矢量是正根, 其余是负根.

由这些正根中可选出 ℓ 个素根. 对 SO(2ℓ) 群有

$$\boldsymbol{r}_\mu = \boldsymbol{e}_\mu - \boldsymbol{e}_{\mu+1}, \qquad \boldsymbol{r}_\ell = \boldsymbol{e}_{\ell-1} + \boldsymbol{e}_\ell, \qquad 1 \leqslant \mu \leqslant \ell - 1 \qquad (7.98)$$

素根半长度 $d_\mu = 1$. 除了 $\boldsymbol{r}_\ell$ 外, 相邻素根夹角为 2π/3, 但 $\boldsymbol{r}_\ell$ 只与 $\boldsymbol{r}_{\ell-2}$ 的夹角是 2π/3, 与其他素根都垂直. 可见 SO(2ℓ) 群的李代数是 D_ℓ. 所有正根都可表为素根的整数线性组合

$$\boldsymbol{e}_a - \boldsymbol{e}_b = \sum_{\mu=a}^{b-1} \boldsymbol{r}_\mu, \qquad \boldsymbol{e}_a + \boldsymbol{e}_b = \sum_{\mu=a}^{b-1} \boldsymbol{r}_\mu + 2\sum_{\nu=b}^{\ell-2} \boldsymbol{r}_\nu + \boldsymbol{r}_{\ell-1} + \boldsymbol{r}_\ell \qquad (7.99)$$

D_ℓ 李代数的最大根 $\boldsymbol{\omega}$ 是

$$\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 = \boldsymbol{r}_1 + 2\sum_{\nu=2}^{\ell-2} \boldsymbol{r}_\nu + \boldsymbol{r}_{\ell-1} + \boldsymbol{r}_\ell \qquad (7.100)$$

对 SO(2ℓ + 1) 群, 素根为

$$\boldsymbol{r}_\mu = \boldsymbol{e}_\mu - \boldsymbol{e}_{\mu+1}, \qquad \boldsymbol{r}_\ell = \boldsymbol{e}_\ell, \qquad 1 \leqslant \mu \leqslant \ell - 1 \qquad (7.101)$$

素根半长度, 除了 $d_\ell = 1/2$ 外, 其余 $d_\mu = 1$. 除了 $\boldsymbol{r}_\ell$ 外, 相邻素根夹角为 2π/3, 但 $\boldsymbol{r}_\ell$ 与 $\boldsymbol{r}_{\ell-1}$ 的夹角是 3π/4. 可见 SO(2ℓ + 1) 群的李代数是 B_ℓ. 所有正根都可表为素

根的整数线性组合

$$\boldsymbol{e}_a-\boldsymbol{e}_b=\sum_{\mu=a}^{b-1}\boldsymbol{r}_\mu,\qquad \boldsymbol{e}_a+\boldsymbol{e}_b=\sum_{\mu=a}^{b-1}\boldsymbol{r}_\mu+2\sum_{\nu=b}^{\ell}\boldsymbol{r}_\nu,\qquad \boldsymbol{e}_a=\sum_{\mu=a}^{\ell}\boldsymbol{r}_\mu \tag{7.102}$$

B_ℓ 李代数的最大根 $\boldsymbol{\omega}$ 是

$$\boldsymbol{\omega}=\boldsymbol{e}_1+\boldsymbol{e}_2=\boldsymbol{r}_1+2\sum_{\nu=2}^{\ell}\boldsymbol{r}_\nu \tag{7.103}$$

三、酉辛群及其李代数 C_ℓ

在 2ℓ 维空间, 矢量指标 a 按下列次序取 j 或 $\overline{j}$, $1\leqslant j\leqslant \ell$,

$$a=1,\ \overline{1},\ 2,\ \overline{2},\ \cdots,\ \ell,\ \overline{\ell}. \tag{7.104}$$

引入 2ℓ 维反对称矩阵 J

$$J_{ab}=\begin{cases}1, & \text{当}\ \ a=j,\quad b=\overline{j}\\ -1, & \text{当}\ \ a=\overline{j},\quad b=j\\ 0, & \text{其他}\end{cases} \tag{7.105}$$

即

$$J=\mathbf{1}_\ell\times(\mathrm{i}\sigma_2)=-J^{-1}=-J^T\ ,\qquad \det\ J=1 \tag{7.106}$$

作为实正交矩阵的推广, 把实正交矩阵定义中的单位矩阵 $\mathbf{1}$ 换成反对称矩阵 J

$$R^TJR=J\ ,\qquad R^*=R \tag{7.107}$$

称为实赝正交矩阵. 实赝正交矩阵的乘积仍是实赝正交矩阵. 矩阵乘积满足结合律, 恒元满足式 (7.107), 也是实赝正交矩阵, 实赝正交矩阵 R 的逆矩阵和转置也是实赝正交矩阵

$$R^{-1}=-JR^TJ,\qquad RJR^T=J,\qquad \left(R^{-1}\right)^TJR^{-1}=(-JRJ)JR^{-1}=J \tag{7.108}$$

所有 $(2\ell)\times(2\ell)$ 实赝正交矩阵 R 的集合, 按照矩阵乘积构成群, 称为实辛群 (real symplectic group), 记作 $\mathrm{Sp}(2\ell,R)$. 附录 27 中证明, 实赝正交矩阵的行列式为 1, 因而实辛群是简单李群. 当实辛群中元素 R 是对角矩阵时, 由定义式 (7.107) 得

$$R=\mathrm{diag}\left\{e^{\omega_1},\ e^{-\omega_1},\ e^{\omega_2},\ e^{-\omega_2},\ \cdots,\ e^{\omega_\ell},\ e^{-\omega_\ell}\right\}$$

其中, 参数 ω_j 可取任意大的实数. 因此实辛群不是紧致李群.

把式 (7.107) 中的实矩阵 R 换成幺正矩阵 u, 同样可以证明, 所有满足

$$u^T J u = J\ , \qquad u^\dagger = u^{-1} \tag{7.109}$$

的 $(2\ell)\times(2\ell)$ 幺正矩阵 u 的集合构成群, 称为酉辛群 (unitary symplectic group), 记作 USp(2ℓ). 因为幺正矩阵的矩阵元素的模不大于 1, 所以酉辛群是紧致李群. 实辛群和酉辛群常统称辛群.

当 $\ell=1$ 时, $J=\mathrm{i}\sigma_2$. 由于

$$(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})^T(\mathrm{i}\sigma_2) = -(\mathrm{i}\sigma_2)(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})$$

SU(2) 群元素满足式 (7.109), SU(2) 群就是 USp(2) 群.

讨论无穷小元素 $R\in \mathrm{Sp}(2\ell,R)$ 和 $u\in$USp(2ℓ)

$$\begin{aligned} &R = \mathbf{1}-\mathrm{i}\alpha X, \qquad X^T = JXJ, \qquad X^* = -X, \\ &u = \mathbf{1}-\mathrm{i}\beta Y, \qquad Y^T = JYJ, \qquad Y^\dagger = Y \end{aligned} \tag{7.110}$$

2ℓ 维的虚矩阵 X 和厄米矩阵 Y 各包含 $4\ell^2$ 个实参数. $X^T=JXJ$ 写成分量形式为

$$X_{kj} = -X_{\overline{j}\overline{k}}, \qquad X_{\overline{k}j} = X_{\overline{j}k}, \qquad X_{k\overline{j}} = X_{j\overline{k}}$$

共给出 $\ell^2+\ell(\ell-1)/2+\ell(\ell-1)/2=\ell(2\ell-1)$ 个约束条件. $Y^T=JYJ$ 写成分量形式为

$$Y_{kj} = -Y_{\overline{j}\overline{k}}, \qquad Y_{\overline{k}j} = Y_{\overline{j}k}$$

由于 Y 的厄米性, 上式给出的实约束条件仍是 $\ell^2+\ell(\ell-1)=\ell(2\ell-1)$ 个. 这样, 无论是实辛群还是酉辛群, 阶数 g 都是 $4\ell^2-\ell(2\ell-1)=\ell(2\ell+1)$. 附录 28 中根据辛群元素的定义直接数出辛群元素的独立实参数个数为 $\ell(2\ell+1)$.

酉辛群 USp(2ℓ) 自身表示的生成元可利用 SU(ℓ) 群自身表示的生成元 $T^{(1)}_{jk}$, $T^{(2)}_{jk}$ 和泡利矩阵 σ_d 来表出. 按照式 (7.110) 的要求, 有

$$\begin{aligned} &T^{(2)}_{jk}\times \mathbf{1}_2, \qquad T^{(1)}_{jk}\times\sigma_d, \qquad T^{(1)}_{jj}\times\sigma_d/\sqrt{2}, \\ &1\leqslant d\leqslant 3, \qquad 1\leqslant j<k\leqslant \ell \end{aligned} \tag{7.111}$$

生成元的个数为 $\ell(\ell-1)/2+3\ell(\ell-1)/2+3\ell=\ell(2\ell+1)$. 这些生成元满足归一化条件 $\mathrm{Tr}(T_AT_B)=\delta_{AB}$, 它保证了结构常数关于三个指标完全反对称, 也保证了基林型是负常数矩阵, 即酉辛群的实李代数是紧致的.

实辛群 Sp$(2\ell,R)$ 自身表示的生成元是纯虚矩阵, 因而只要把式 (7.111) 中的 σ_1 和 σ_3 矩阵乘 i, 变成纯虚的 τ_1 和 τ_3 矩阵

$$\tau_1 = \mathrm{i}\sigma_1, \qquad \tau_3 = \mathrm{i}\sigma_3 \tag{7.112}$$

就得到实辛群 Sp$(2\ell, R)$ 自身表示的生成元. 由于部分生成元添了 i, 使实辛群变成非紧致李群. 如果把 i 归到参数中去, 允许实辛群部分参数取纯虚数, 则酉辛群和实辛群的不等价不可约表示一一对应. 表示对应的生成元相同, 只是参数实数性条件不同. 这是计算非紧致李群不可约表示的标准方法. 我们也将在第九章用此方法研究洛伦兹群的不可约表示.

酉辛群 USp(2ℓ) 自身表示生成元式 (7.111) 中的对角矩阵构成酉辛群李代数中的嘉当子代数

$$H_j = T_{jj}^{(1)} \times \sigma_3/\sqrt{2}, \qquad 1 \leqslant j \leqslant \ell \tag{7.113}$$

余下的生成元要组合成 H_j 的共同本征矢量, 即 $[H_j,\ E_{\boldsymbol{\alpha}}] = \alpha_j E_{\boldsymbol{\alpha}}$

$$\begin{aligned}
E_{jk}^{(1)} &= \left\{T_{jk}^{(1)} \times \sigma_3 + \mathrm{i}T_{jk}^{(2)} \times \mathbf{1}_2\right\}/\sqrt{2}, \\
E_{jk}^{(2)} &= \left\{T_{jk}^{(1)} \times \sigma_3 - \mathrm{i}T_{jk}^{(2)} \times \mathbf{1}_2\right\}/\sqrt{2}, \\
E_{jk}^{(3)} &= T_{jk}^{(1)} \times (\sigma_1 + \mathrm{i}\sigma_2)/\sqrt{2}, \\
E_{jk}^{(4)} &= T_{jk}^{(1)} \times (\sigma_1 - \mathrm{i}\sigma_2)/\sqrt{2}, \qquad\qquad j < k \\
E_{j}^{(5)} &= T_{jj}^{(1)} \times (\sigma_1 + \mathrm{i}\sigma_2)/2, \\
E_{j}^{(6)} &= T_{jj}^{(1)} \times (\sigma_1 - \mathrm{i}\sigma_2)/2,
\end{aligned} \tag{7.114}$$

对应的根矢量分别为 $\sqrt{1/2}\,(\boldsymbol{e}_j - \boldsymbol{e}_k)$, $-\sqrt{1/2}\,(\boldsymbol{e}_j - \boldsymbol{e}_k)$, $\sqrt{1/2}\,(\boldsymbol{e}_j + \boldsymbol{e}_k)$, $-\sqrt{1/2}(\boldsymbol{e}_j + \boldsymbol{e}_k)$, $\sqrt{2}\boldsymbol{e}_j$ 和 $-\sqrt{2}\boldsymbol{e}_j$. 第一, 第三和第五组根是正根, 从中选出素根

$$\boldsymbol{r}_\mu = \sqrt{1/2}\,(\boldsymbol{e}_\mu - \boldsymbol{e}_{\mu+1}), \qquad 1 \leqslant \mu \leqslant \ell - 1, \qquad \boldsymbol{r}_\ell = \sqrt{2}\boldsymbol{e}_\ell \tag{7.115}$$

前 $\ell - 1$ 个素根是较短根, $d_\mu = (\boldsymbol{r}_\mu \cdot \boldsymbol{r}_\mu)/2 = 1/2$, 最后一个素根是较长根, $d_\ell = 1$. 除了 $\boldsymbol{r}_\ell$ 外, 相邻素根夹角为 $2\pi/3$, 但 $\boldsymbol{r}_\ell$ 与 $\boldsymbol{r}_{\ell-1}$ 的夹角是 $3\pi/4$. 可见 USp(2ℓ) 群的李代数是 C_ℓ. 所有正根都可表为素根的整数线性组合

$$\begin{aligned}
\sqrt{1/2}\,(\boldsymbol{e}_j - \boldsymbol{e}_k) &= \sum_{\mu=j}^{k-1} \boldsymbol{r}_\mu \\
\sqrt{1/2}\,(\boldsymbol{e}_j + \boldsymbol{e}_k) &= \sum_{\mu=j}^{k-1} \boldsymbol{r}_\mu + 2\sum_{\mu=k}^{\ell-1} \boldsymbol{r}_\mu + \boldsymbol{r}_\ell \\
\sqrt{2}\boldsymbol{e}_j &= 2\sum_{\mu=j}^{\ell-1} \boldsymbol{r}_\mu + \boldsymbol{r}_\ell
\end{aligned} \tag{7.116}$$

C_ℓ 李代数的最大根是

$$\boldsymbol{\omega} = \sqrt{2}\boldsymbol{e}_1 = 2\sum_{\mu=1}^{\ell-1} \boldsymbol{r}_\mu + \boldsymbol{r}_\ell \tag{7.117}$$

7.5　单纯李代数的线性表示

无论是李群还是李代数的研究, 都要落实到不等价不可约表示的研究. 研究李代数的线性表示, 就是研究表示的生成元, 这在大多数物理问题中已经够用了. 李代数的真实表示同构于李代数, 但只是局域同构于李群, 因而对李群来说它可能是非真实表示或多值表示等. 本节研究单纯李代数不可约表示的性质, 描写方法和状态基的标记, 下节再介绍生成元表示矩阵的具体计算方法.

一、表示和权

单纯李代数有紧致实形, 紧致实李代数的线性表示等价于幺正表示. 为了强调生成元算符和生成元在给定表示中的表示矩阵, 有时我们把生成元的表示矩阵写成 $D(H_j)$ 和 $D(E_{\boldsymbol{\alpha}})$. 在幺正表示中, 嘉当 – 外尔基满足

$$D(H_j)^\dagger = D(H_j)\ , \qquad D(E_{\boldsymbol{\alpha}})^\dagger = D(E_{-\boldsymbol{\alpha}}) \tag{7.118}$$

通常取这 ℓ 个互相对易的厄米算符 H_j 的共同的正交归一的本征矢量作为表示空间的基. 为了与嘉当 – 外尔基相区别, 今后把表示空间的基称为状态基, 或简称为态, 记作 $|\boldsymbol{m}\rangle$

$$H_j\ |\boldsymbol{m}\rangle = m_j\ |\boldsymbol{m}\rangle \tag{7.119}$$

ℓ 个本征值排列成 ℓ 维空间的矢量 $\boldsymbol{m}$, 称为这个态的权矢量, 简称权, 有时权矢量也用排列起来的分量 $(m_1,\ \cdots,\ m_\ell)$ 描写. 这 ℓ 维空间称为权空间. 权空间和根空间维数是相同的. 在一个不可约表示中, 若有 n 个线性无关的态对应一个共同的权, 则此权称为重权, n 称为权的重数. 当 $n=1$ 时, 此权称为单权.

以生成元为状态基得到的表示就是伴随表示, 因而在伴随表示中, 权矢量和根矢量是重合的. 如果李代数的秩为 2, 则可以在平面图形中分别画出根矢量和权矢量, 这就是所谓的根图和平面权图. 伴随表示的平面权图和根图重合. 秩数较高时, 这样的根图和权图应用起来都不方便, 常改用其他方法来描述.

除恒等表示外, 单纯李代数的不可约表示都是真实表示, 生成元及其线性组合的表示矩阵都不是零矩阵, 因此权矢量必张开 ℓ 维空间, 即至少存在 ℓ 个线性无关的权矢量. 由正则对易关系式 (7.42)

$$[H_j,\ E_{\boldsymbol{\alpha}}] = \alpha_j E_{\boldsymbol{\alpha}}\ , \qquad [E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{-\boldsymbol{\alpha}}] = \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{H} = H_{\boldsymbol{\alpha}}$$

得

$$\mathrm{Tr}D(E_{\boldsymbol{\alpha}}) = 0\ , \qquad \mathrm{Tr}D(H_{\boldsymbol{\alpha}}) = 0\ , \qquad \mathrm{Tr}D(H_j) = 0 \tag{7.120}$$

后式表明, 在不可约表示中, 所有态的权矢量之和为零

$$\sum \boldsymbol{m} = 0 \tag{7.121}$$

这里的求和, 要包括对重权的所有态求和.

在选定的分量排列次序下, 若两权之差 $\boldsymbol{m} - \boldsymbol{m}'$ 的第一个不为零分量为正值, 则称权 $\boldsymbol{m}$ 高于权 $\boldsymbol{m}'$. 设 $\boldsymbol{\alpha}$ 是正根, 由正则对易关系得

$$\begin{aligned} H_j\left(E_{\pm\boldsymbol{\alpha}}\left|\boldsymbol{m}\right\rangle\right) &= \left[H_j,\ E_{\pm\boldsymbol{\alpha}}\right]\left|\boldsymbol{m}\right\rangle + E_{\pm\boldsymbol{\alpha}}H_j\left|\boldsymbol{m}\right\rangle \\ &= \left(m_j \pm \boldsymbol{\alpha}_j\right)\ \left(E_{\pm\boldsymbol{\alpha}}\left|\boldsymbol{m}\right\rangle\right) \end{aligned} \tag{7.122}$$

可见 $E_{\boldsymbol{\alpha}}$ 的作用, 使态 $|\boldsymbol{m}\rangle$ 的权 $\boldsymbol{m}$ 升高一个正根 $\boldsymbol{\alpha}$, 而 $E_{-\boldsymbol{\alpha}}$ 的作用, 使权降低 $\boldsymbol{\alpha}$. 因此, $E_{\boldsymbol{\alpha}}$ 称为升权算符, 简称升算符, $E_{-\boldsymbol{\alpha}}$ 称为降权算符, 简称降算符. 在有限维表示中必有一个状态基 $|\boldsymbol{M}\rangle$, 对应的权 $\boldsymbol{M}$ 高于所有其他态的权, 这样的权 $\boldsymbol{M}$ 称为该表示的最高权, $|\boldsymbol{M}\rangle$ 称为最高权态. 升权算符作用在最高权态上得零

$$E_{\boldsymbol{\alpha}}\left|\boldsymbol{M}\right\rangle = 0\ , \qquad \boldsymbol{\alpha}\ \text{是任何正根},\ \ \boldsymbol{M}\ \text{是最高权} \tag{7.123}$$

这是最高权态的充要条件, 也是计算最高权态的主要方法. 下面定理进一步显示最高权在李代数表示理论中的重要地位.

定理六 单纯李代数不可约表示的最高权是单权, 两不可约表示等价的充要条件是它们的最高权相等.

证明 设状态基 $|\boldsymbol{M}\rangle$ 对应不可约表示的最高权 $\boldsymbol{M}$, 则表示空间所有状态都可表为下式及其线性组合

$$E_{\boldsymbol{\lambda}} \cdots E_{\boldsymbol{\beta}} E_{\boldsymbol{\alpha}}\left|\boldsymbol{M}\right\rangle \tag{7.124}$$

由式 (7.122) 知, 式 (7.124) 也是 H_j 的共同本征矢量, 对应确定的权. 若表示空间中另有状态也对应最高权 $\boldsymbol{M}$, 我们要证明它与状态基 $|\boldsymbol{M}\rangle$ 至多相差一个常系数. 此态必可表成式 (7.124) 的线性组合, 其中每一项都对应最高权. 逐项进行讨论, 如果形如式 (7.124) 的态对应最高权, 则它不仅包含降算符, 也必须包含升算符. 按照正则对易关系式 (7.42), 把升算符向右移

$$E_{\boldsymbol{\rho}} E_{\boldsymbol{\tau}} = E_{\boldsymbol{\tau}} E_{\boldsymbol{\rho}} + \left[E_{\boldsymbol{\rho}},\ E_{\boldsymbol{\tau}}\right]$$

第二项或者为零, 或者是 $\boldsymbol{\rho}\cdot\boldsymbol{H}$ (它作用在态上得常系数), 或者是常系数乘 $E_{\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\tau}}$, 总之, 第二项包含的生成元数目在减少. 用此法可把升权算符 $E_{\boldsymbol{\rho}}$ 一直移到最右面, 并作用在 $|\boldsymbol{M}\rangle$ 上得零, 其结果也使生成元减少. 在所有这样的移动过程中, 只是产生一些常系数和增加一定的组合项, 而每一个组合项所包含的生成元数目都不增加, 最后一定可以把所有的升算符全都移到最右面并消去. 在每一项中, 一旦没有了升

算符, 也就不能再包含降算符, 否则这项对应的权就要低于 $\boldsymbol{M}$. 这就是说, 每一项都是常系数乘 $|\boldsymbol{M}\rangle$, 即 $|\boldsymbol{M}\rangle$ 是单权.

若两表示等价, 最高权显然相等. 若两表示最高权相等, 让两表示的最高权态 $|\boldsymbol{M}\rangle$ 和 $|\boldsymbol{M}\rangle'$ 对应起来, 而且经生成元 $E_{\boldsymbol{\alpha}}$ 作用后的态也对应起来

$$|j\rangle \equiv E_{\boldsymbol{\lambda}}\cdots E_{\boldsymbol{\beta}}E_{\boldsymbol{\alpha}}\,|\boldsymbol{M}\rangle \;\longleftrightarrow\; |j\rangle' \equiv E_{\boldsymbol{\lambda}}\cdots E_{\boldsymbol{\beta}}E_{\boldsymbol{\alpha}}\,|\boldsymbol{M}\rangle'$$

现在要证明这种对应关系是一一对应关系, 即在一个表示空间成立的任何线性关系, 在另一个表示空间也一定成立, 若有

$$\sum_j c_j\,|j\rangle = 0\,, \qquad \text{必有}\;\sum_j c_j\,|j\rangle' \equiv |w\rangle' = 0$$

反之亦然. 用反证法. 若 $|w\rangle' \neq 0$, 则在 $|w\rangle'$ 上再作用任何生成元得到的态, 都对应第一个表示空间中的零矢量, 因而这样的态的集合在第二个表示空间中构成了一个不变子空间, 它又没有充满整个表示空间, 因为 $|\boldsymbol{M}\rangle'$ 态不在此子空间中. 由表示的不可约性得 $|w\rangle' = 0$. 既然两表示空间的状态基一一对应, 且此对应关系在生成元作用下保持不变, 因而它们等价. 证完.

既然单纯李代数的不等价不可约表示可以用最高权 $\boldsymbol{M}$ 来描写, 单纯李代数的不可约表示也常称为最高权表示. 因为以生成元为状态基得到的表示就是伴随表示, 所以伴随表示的最高权就是单纯李代数的最大根 $\boldsymbol{\omega}$.

二、权链和外尔反射

与定理三对应, 关于表示空间的权也有一个重要定理, 它是具体计算单纯李代数不可约表示的基础.

定理七　在单纯李代数任一个不可约表示的表示空间中, 若 $\boldsymbol{m}$ 是一个权, $\boldsymbol{\alpha}$ 是一个根, 则

$$\frac{2\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\alpha}}{|\boldsymbol{\alpha}|^2} \equiv \Gamma\left(\boldsymbol{m}/\boldsymbol{\alpha}\right) = \;\text{整数} \tag{7.125}$$

且 $\boldsymbol{m} - \Gamma\left(\boldsymbol{m}/\boldsymbol{\alpha}\right)\boldsymbol{\alpha}$ 也是一个重数与 $\boldsymbol{m}$ 相同的权.

证明　权和根有重要的不同, 权 $\boldsymbol{m}$ 可以有重权, 即它可对应若干个线性无关的状态基, 而且状态基的任何线性组合都可以作为状态基. 我们需要规定一个原则来选定这重权的状态基. 这里采用的方法与量子力学中的矩阵力学方法很类似, 请参看附录 11.

由于 $\pm\boldsymbol{\alpha}$ 的地位平等, 为确定起见, 不失普遍性, 设

$$\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\alpha} \geqslant 0 \tag{7.126}$$

先任取一个态 $|\boldsymbol{m}\rangle$, 对应权 $\boldsymbol{m}$. 不断用算符 $E_{\boldsymbol{\alpha}}$ 作用, 由于表示维数有限, 最后总会得零. 设

$$\begin{aligned} &E_{\boldsymbol{\alpha}}^{n}\ |\boldsymbol{m}\rangle \neq 0\ , && 0 \leqslant n \leqslant p, \\ &|\boldsymbol{m}+p\boldsymbol{\alpha}\rangle \equiv E_{\boldsymbol{\alpha}}^{p}\ |\boldsymbol{m}\rangle, && E_{\boldsymbol{\alpha}}^{p+1}\ |\boldsymbol{m}\rangle = 0 \end{aligned}$$

现在忘掉刚才对态 $|\boldsymbol{m}\rangle$ 的选择, 以新的态 $|\boldsymbol{m}+p\boldsymbol{\alpha}\rangle$ 作为出发点, 定义如下一系列状态基

$$\begin{aligned} &|\boldsymbol{m}+n\boldsymbol{\alpha}\rangle \equiv E_{-\boldsymbol{\alpha}}^{p-n}\ |\boldsymbol{m}+p\boldsymbol{\alpha}\rangle\ , && -q \leqslant n \leqslant p, \\ &E_{-\boldsymbol{\alpha}}^{p+q+1}\ |\boldsymbol{m}+p\boldsymbol{\alpha}\rangle = 0\ , && p+q+1>0 \end{aligned} \tag{7.127}$$

这里只限制 q 是有限的整数, 满足 $p+q+1>0$. 特别注意, 式 (7.127) 算得的态 $|\boldsymbol{m}\rangle$, 若与最初选择的态不同, 以式 (7.127) 为准. 式 (7.127) 给出的 $p+q+1$ 个状态 $|\boldsymbol{m}+n\boldsymbol{\alpha}\rangle$, 对应一个状态链, 我们要证明这些态构成的子空间, 在 $E_{\pm\boldsymbol{\alpha}}$ 作用下是封闭的, 就是要证明

$$E_{\boldsymbol{\alpha}}\ |\boldsymbol{m}+n\boldsymbol{\alpha}\rangle = B_n\ |\boldsymbol{m}+(n+1)\boldsymbol{\alpha}\rangle \tag{7.128}$$

B_n 是待定系数. 用数学归纳法

$$\begin{aligned} &E_{\boldsymbol{\alpha}}\ |\boldsymbol{m}+p\boldsymbol{\alpha}\rangle = 0, \\ &E_{\boldsymbol{\alpha}}\ |\boldsymbol{m}+(p-1)\boldsymbol{\alpha}\rangle = E_{\boldsymbol{\alpha}}E_{-\boldsymbol{\alpha}}\ |\boldsymbol{m}+p\boldsymbol{\alpha}\rangle = [E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{-\boldsymbol{\alpha}}]\ \ |\boldsymbol{m}+p\boldsymbol{\alpha}\rangle \\ &\quad = \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{H}\ |\boldsymbol{m}+p\boldsymbol{\alpha}\rangle = \left(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\alpha}+p|\boldsymbol{\alpha}|^2\right)\ |\boldsymbol{m}+p\boldsymbol{\alpha}\rangle \end{aligned}$$

即

$$B_p = 0\ , \qquad B_{p-1} = \boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\alpha}+p|\boldsymbol{\alpha}|^2 \tag{7.129}$$

现在设式 (7.128) 对 $n>k$ 都成立, 当 $n=k$ 时有

$$\begin{aligned} E_{\boldsymbol{\alpha}}\ |\boldsymbol{m}+k\boldsymbol{\alpha}\rangle &= E_{\boldsymbol{\alpha}}E_{-\boldsymbol{\alpha}}\ |\boldsymbol{m}+(k+1)\boldsymbol{\alpha}\rangle \\ &= [E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{-\boldsymbol{\alpha}}]\ |\boldsymbol{m}+(k+1)\boldsymbol{\alpha}\rangle + E_{-\boldsymbol{\alpha}}E_{\boldsymbol{\alpha}}\ |\boldsymbol{m}+(k+1)\boldsymbol{\alpha}\rangle \\ &= \left\{\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\alpha}+(k+1)|\boldsymbol{\alpha}|^2+B_{k+1}\right\}\ |\boldsymbol{m}+(k+1)\boldsymbol{\alpha}\rangle \end{aligned}$$

因此式 (7.128) 得证, 而且算得 B_n 的递推关系

$$\begin{aligned} B_n &= B_{n+1}+\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\alpha}+(n+1)|\boldsymbol{\alpha}|^2 \\ &= B_{n+2}+2\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\alpha}+\{(n+1)+(n+2)\}\,|\boldsymbol{\alpha}|^2 \\ &= \cdots \\ &= B_{n+(p-n)}+(p-n)\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\alpha}+\frac{1}{2}(p-n)(n+p+1)|\boldsymbol{\alpha}|^2 \\ &= \frac{1}{2}(p-n)\left\{2\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\alpha}+(n+p+1)|\boldsymbol{\alpha}|^2\right\} \end{aligned}$$

另一方面

$$
\begin{aligned}
0 &= E_{\boldsymbol{\alpha}} E_{-\boldsymbol{\alpha}} \, |\boldsymbol{m} - q\boldsymbol{\alpha}\rangle \\
&= \{[E_{\boldsymbol{\alpha}}, \, E_{-\boldsymbol{\alpha}}] + E_{-\boldsymbol{\alpha}} E_{\boldsymbol{\alpha}}\} \, |\boldsymbol{m} - q\boldsymbol{\alpha}\rangle \\
&= \left\{\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{\alpha} - q|\boldsymbol{\alpha}|^2 + B_{-q}\right\} \, |\boldsymbol{m} - q\boldsymbol{\alpha}\rangle
\end{aligned}
$$

把两种方法算得的 B_{-q} 进行比较, 得

$$
B_{-q} = -\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{\alpha} + q|\boldsymbol{\alpha}|^2 = \frac{1}{2}(p+q)\left\{2\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{\alpha} + (-q+p+1)|\boldsymbol{\alpha}|^2\right\}
$$

$$
(p+q+1)\left\{2\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{\alpha} - (q-p)|\boldsymbol{\alpha}|^2\right\} = 0
$$

因为 $p+q+1>0$, $|\boldsymbol{\alpha}|^2>0$, 所以式 (7.125) 得证, 而且算得此整数为 $q-p$, 即

$$
\Gamma\left(\boldsymbol{m}/\boldsymbol{\alpha}\right) = \frac{2\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{\alpha}}{|\boldsymbol{\alpha}|^2} = q - p = \text{整数} \tag{7.130}
$$

按照我们的约定式 (7.126), 上式是非负整数, 因而 $q \geqslant p \geqslant 0$, 式 (7.127) 给出的状态链中, 确实包含一个对应权 $\boldsymbol{m}$ 的态 $|\boldsymbol{m}\rangle$, 也包含一个对应权 $\boldsymbol{m}'$ 的态 $|\boldsymbol{m}'\rangle$

$$
\boldsymbol{m}' \equiv \boldsymbol{m} - \Gamma\left(\boldsymbol{m}/\boldsymbol{\alpha}\right)\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{m} - (q-p)\boldsymbol{\alpha} \tag{7.131}
$$

在与式 (7.127) 给出的态正交的子空间里, 再取一个新的权为 $\boldsymbol{m}$ 的态, 重复上述步骤, 又得到一组状态链, 其中也一定包含一对态, 分别有权 $\boldsymbol{m}$ 和 $\boldsymbol{m}'$. 若权 $\boldsymbol{m}$ 是 d 重的, 则用上法计算 d 次后, 得到 d 对态, 分别对应权 $\boldsymbol{m}$ 和 $\boldsymbol{m}'$. 这说明权 $\boldsymbol{m}'$ 的重数 d' 不小于 d. 把这证明倒过来进行, 由权为 $\boldsymbol{m}'$ 的态计算权为 $\boldsymbol{m}$ 的态, 同样可证 d 不小于 d', 因而两权重数相同. 这样两个权 $\boldsymbol{m}$ 和 $\boldsymbol{m}'$ 称为等价权. 证完.

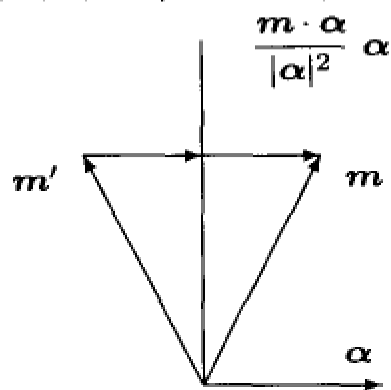


图 7.2　外尔反射

在 ℓ 维权空间, 对通过原点垂直根 $\boldsymbol{\alpha}$ 平面的反射称为外尔反射. 如图 7.2 所示, 两个等价的权 $\boldsymbol{m}$ 和 $\boldsymbol{m}'$ 可通过外尔反射相联系. 外尔反射乘积定义为相继做两次反射, 外尔反射的所有乘积的集合构成群, 称为外尔群 W. 通过各种外尔反射联系起来的所有等价权的数目称为此权的外尔轨道长度 (size of orbit).

定理八 (邓金定理)　权 $\boldsymbol{M}$ 可以作为单纯李代数一个有限维不可约表示的最高权的充要条件是, 对单纯李代数的所有素根 $\boldsymbol{r}_\mu$, 权 $\boldsymbol{M}$ 满足

$$
\Gamma\left(\boldsymbol{M}/\boldsymbol{r}_\mu\right) = \text{非负整数} \tag{7.132}
$$

我们只对这一定理做些解释. 如果 $\boldsymbol{M}$ 是某不可约表示的最高权, 则由最高权的定义式 (7.123) 和定理七, 式 (7.132) 显然满足. 反之, 邓金证明了, 若 $\boldsymbol{M}$ 满足式 (7.132), 则以它作为单的最高权, 可以得到单纯李代数的一个有限维不可约表示, 即在它对应的不简并的态 $|\boldsymbol{M}\rangle$ 上, 用升算符作用得零, 用一系列降算符作用, 得到的态空间集合一定是有限的, 对应单纯李代数的一个有限维不可约表示. 这是用方块权图方法计算单纯李群不可约表示的基础.

满足式 (7.132) 的权 $\boldsymbol{M}$ 称为主权 (dominant weight). 单纯李代数任一不可约表示的最高权一定是主权, 但一个给定的不可约表示中可能有好几个权是主权, 它们在这个不可约表示中不一定是最高权, 也不一定是单权, 但每个主权都可以是一个不可约表示的最高权. 一个不可约表示的维数等于它包含的状态基的数目. 状态基对应的权都等价于某个主权. 因此不可约表示的维数等于该表示所包含的各主权的重数和各主权的外尔轨道长度的乘积之和.

* 三、最高权表示的性质

对于给定的单纯李代数, 最高权 $\boldsymbol{M}$ 给出了该不可约表示的全部性质. 限于篇幅, 本书不做深入讨论, 只给出一些主要结果.

单纯李代数 $\mathcal{L}$ 对应的紧致李群 G 中, 存在由嘉当子代数产生的阿贝尔子李群 H, H 的元素可用 ℓ 个参数 $\boldsymbol{\varphi} \equiv (\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_\ell)$ 来描写

$$R = \exp\left\{-\mathrm{i}\sum_{j=1}^{\ell} \varphi_j H_j\right\} \in H \tag{7.133}$$

群 G 中每一个元素都与 H 中某一个元素共轭, 因而参数 $\boldsymbol{\varphi}$ 可以用来描写群 G 的类. 在不可约表示 $\boldsymbol{M}$ 中, 类 $\boldsymbol{\varphi}$ 的特征标为

$$\chi(\boldsymbol{M},\boldsymbol{\varphi}) = \mathrm{Tr}\ \exp\left\{-\mathrm{i}\sum_{j=1}^{\ell} \varphi_j D(H_j)\right\} = \sum_{\boldsymbol{m}} b(\boldsymbol{m}) \exp\left\{-\mathrm{i}\sum_{j=1}^{\ell} \varphi_j m_j\right\} \tag{7.134}$$

$b(\boldsymbol{m})$ 是权 $\boldsymbol{m}$ 的重数, 因而对 $\boldsymbol{m}$ 带权 $b(\boldsymbol{m})$ 的求和就是对不可约表示所有状态求和. 为了计算特征标, 外尔引入环链 (girdle) $\xi(\boldsymbol{K},\boldsymbol{\varphi})$ 的概念. 设 S 是外尔群 W 的任意元素, 用反射宇称 δ_S 描写 S 中包含外尔反射次数的偶奇性, 偶数次反射 $\delta_S = 1$, 否则为 -1. 环链 ξ 定义为

$$\xi(\boldsymbol{K},\boldsymbol{\varphi}) = \sum_{S\in W} \delta_S \exp\left\{-\mathrm{i}\sum_{j=1}^{\ell} (S\boldsymbol{K})_j\, \varphi_j\right\} \tag{7.135}$$

其中, $\boldsymbol{K} = \boldsymbol{M} + \boldsymbol{\rho}$, $\boldsymbol{\rho}$ 是单纯李代数 $\mathcal{L}$ 中全部正根和的一半. 类 $\boldsymbol{\varphi}$ 在表示 $\boldsymbol{M}$ 中的特征标为

$$\chi(\boldsymbol{M},\boldsymbol{\varphi})=\frac{\xi(\boldsymbol{K},\boldsymbol{\varphi})}{\xi(\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\varphi})} \tag{7.136}$$

$\xi(\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\varphi})$ 与具体表示无关, 它的模平方是紧致李群类上积分的密度函数. 因此两不等价不可约表示的特征标正交归一性表为

$$\int\chi(\boldsymbol{M},\boldsymbol{\varphi})^*\chi(\boldsymbol{M}',\boldsymbol{\varphi})|\xi(\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\varphi})|^2(\mathrm{d}\varphi)=\int\xi(\boldsymbol{K},\boldsymbol{\varphi})^*\xi(\boldsymbol{K}',\varphi)(\mathrm{d}\varphi)=\delta_{KK'} \tag{7.137}$$

当 φ 趋于零时, $\chi(\boldsymbol{M},0)$ 是不定式, 它趋于不可约表示 $\boldsymbol{M}$ 的维数 $d(\boldsymbol{M})$, 计算得

$$d(\boldsymbol{M})=\prod_{\boldsymbol{\alpha}\in\Delta_+}\left\{1+\frac{\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{\rho}\cdot\boldsymbol{\alpha}}\right\} \tag{7.138}$$

其中, Δ_+ 是单纯李代数全部正根的集合. 有了不可约表示的特征标和紧致李群类上积分的密度函数, 原则上可以计算不可约表示直乘约化的克莱布施 – 戈登级数, 但实际运算是很困难的.

四、基本主权

在 ℓ 秩单纯李代数中, 下述 ℓ 个主权 $\boldsymbol{w}_\mu$ 称为基本 (fundamental) 主权

$$\Gamma\left(\boldsymbol{w}_\mu/\boldsymbol{r}_\nu\right)=d_\nu^{-1}\boldsymbol{w}_\mu\cdot\boldsymbol{r}_\nu=\delta_{\mu\nu}\ ,\qquad d_\nu=\boldsymbol{r}_\nu\cdot\boldsymbol{r}_\nu/2 \tag{7.139}$$

根据定理七和八, 任何主权都可表为基本主权的非负整数线性组合, 任何权都可表为基本主权的整数线性组合

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{M}=\sum_{\mu=1}^{\ell}M_\mu\boldsymbol{w}_\mu\ ,\qquad M_\mu=\Gamma\left(\boldsymbol{M}/\boldsymbol{r}_\mu\right)=\text{非负整数},\\&\boldsymbol{m}=\sum_{\mu=1}^{\ell}m_\mu\boldsymbol{w}_\mu\ ,\qquad m_\mu=\Gamma\left(\boldsymbol{m}/\boldsymbol{r}_\mu\right)=\text{整数}\end{aligned} \tag{7.140}$$

比较式 (7.64) 和 (7.139), 可以把素根和基本主权通过嘉当矩阵联系起来

$$\boldsymbol{r}_\mu=\sum_{\nu=1}\boldsymbol{w}_\nu A_{\nu\mu}\ ,\qquad \boldsymbol{w}_\nu=\sum_{\mu=1}\boldsymbol{r}_\mu\left(A^{-1}\right)_{\mu\nu} \tag{7.141}$$

以基本主权为基, 素根的分量也都是整数, 而且只能取 2, −1, −2, −3 和 0. 正是这性质保证了在基本主权表象中权分量都是整数. 在基本主权的表象中, 等价权的关系式 (7.131) 变得更简单. 设 $m_\mu=\Gamma(\boldsymbol{m}/\boldsymbol{r}_\mu)$ 是权 $\boldsymbol{m}$ 关于 $\boldsymbol{w}_\mu$ 的分量. 经过关于素根 $\boldsymbol{r}_\mu$ 的外尔反射后, 权 $\boldsymbol{m}$ 变成等价权 $\boldsymbol{m}'$

$$\boldsymbol{m}'\ \xrightarrow{\boldsymbol{r}_\mu}\ \boldsymbol{m}-m_\mu\boldsymbol{r}_\mu \tag{7.142}$$

基本主权的优点是所有权和根的分量都是整数, 缺点是它们不一定正交归一. 今后如无特别说明, 我们在权空间和根空间就采用基本主权为基, 仅在讨论平面权图时采用原来的正交基. 以基本主权作为最高权的不可约表示称为基本 (fundamental) 表示.

采用了 d_μ 符号后, 可把素根和基本主权的内积表达得更对称

$$(\boldsymbol{r}_\mu \cdot \boldsymbol{r}_\nu) = d_\mu A_{\mu\nu}\ , \qquad (\boldsymbol{r}_\mu \cdot \boldsymbol{w}_\nu) = d_\mu \delta_{\mu\nu}\ , \qquad (\boldsymbol{w}_\mu \cdot \boldsymbol{w}_\nu) = d_\mu \left(A^{-1}\right)_{\mu\nu} \tag{7.143}$$

文献中常把 $d_\mu A_{\mu\nu}$ 称为对称化嘉当矩阵.

五、二阶卡西米尔不变量和伴随表示

在单纯李代数的紧致实形里, 结构常数关于三个指标完全反对称, 生成元的平方和就可与任一生成元对易

$$\sum_A [I_A I_A,\ I_B] = \sum_A I_A [I_A,\ I_B] + [I_A,\ I_B] I_A = \mathrm{i} \sum_{AD} C_{AB}{}^D (I_A I_D + I_D I_A) = 0$$

这样的生成元平方和称为单纯李代数的二阶卡西米尔 (Casimir) 算子, 记作 C_2. 按舒尔定理, 它在不可约表示 $\boldsymbol{M}$ 中取常数矩阵形式, 此常数称为二阶卡西米尔不变量, 记作 $C_2(\boldsymbol{M})$.

采用生成元的嘉当 - 外尔基

$$C_2 = \sum_A I_A I_A = \sum_{j=1}^{\ell} H_j H_j + \sum_{\boldsymbol{\alpha}\in\Delta_+} \{E_{\boldsymbol{\alpha}} E_{-\boldsymbol{\alpha}} + E_{-\boldsymbol{\alpha}} E_{\boldsymbol{\alpha}}\} \tag{7.144}$$

把它作用在最高权态 $|\boldsymbol{M}\rangle$ 上, 根据式 (7.42) 和 (7.123), 有

$$C_2\,|\boldsymbol{M}\rangle = \boldsymbol{M}^2\,|\boldsymbol{M}\rangle + \sum_{\boldsymbol{\alpha}\in\Delta_+} [E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{-\boldsymbol{\alpha}}]\ |\boldsymbol{M}\rangle = \left\{\boldsymbol{M}^2 + \boldsymbol{M}\cdot \sum_{\boldsymbol{\alpha}\in\Delta_+} \boldsymbol{\alpha}\right\} |\boldsymbol{M}\rangle$$

把单纯李代数所有正根之和记作 $2\boldsymbol{\rho}$, 则二阶卡西米尔不变量 $C_2(\boldsymbol{M})$ 为

$$C_2(\boldsymbol{M}) = \boldsymbol{M}\cdot(\boldsymbol{M}+2\boldsymbol{\rho}) = \sum_{\mu,\nu=1}^{\ell} M_\mu d_\mu \left(A^{-1}\right)_{\mu\nu} (M_\nu + 2) \tag{7.145}$$

现在来证明 $\boldsymbol{\rho}$ 正好等于基本主权之和

$$2\rho = \sum_{\boldsymbol{\alpha}\in\Delta_+} \boldsymbol{\alpha} = 2\sum_{\mu=1}^{\ell} \boldsymbol{w}_\mu \tag{7.146}$$

证明方法就是检验 $2\boldsymbol{\rho}$ 与每个素根 $\boldsymbol{r}_\mu$ 的点乘, 是否都等于 $2d_\mu$. 在正根中, 除了素根 $\boldsymbol{r}_\mu$ 本身外, 都分属关于素根 $\boldsymbol{r}_\mu$ 的根链

$$(\boldsymbol{\alpha}-q\boldsymbol{r}_\mu),\ \cdots,\ (\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{r}_\mu),\ \boldsymbol{\alpha},\ (\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{r}_\mu),\ \cdots,\ (\boldsymbol{\alpha}+p\boldsymbol{r}_\mu)$$

根链中根矢量之和为

$$(p+q+1)\boldsymbol{\alpha}+\frac{1}{2}\left[p(p+1)-q(q+1)\right]\boldsymbol{r}_\mu=(p+q+1)\left[\boldsymbol{\alpha}+\frac{1}{2}(p-q)\boldsymbol{r}_\mu\right]$$

由于定理三, 上式与 $\boldsymbol{r}_\mu$ 的点乘为零. 而素根 $\boldsymbol{r}_\mu$ 平方等于 $2d_\mu$. 证完.

对单纯李群, 伴随表示是不可约表示. 设 $D^{\boldsymbol{M}}(I_A)$ 是不可约表示 $\boldsymbol{M}$ 的生成元, 构造 g 维矩阵 $T(\boldsymbol{M})$, $T_{AB}(\boldsymbol{M})=\mathrm{Tr}[D^{\boldsymbol{M}}(I_A)D^{\boldsymbol{M}}(I_B)]$), 第四章证明了 $T(\boldsymbol{M})$ 与伴随表示每一个生成元 $D^{\mathrm{ad}}(I_D)$ 对易, 从而给出 $T(\boldsymbol{M})$ 是常数矩阵 [见式 (4.129)], 常数记作 $T_2(\boldsymbol{M})$, $T_{AB}(\boldsymbol{M})=\delta_{AB}T_2(\boldsymbol{M})$. 通过 $T(\boldsymbol{M})$ 矩阵取迹, 把此常数与卡西米尔不变量联系起来 [见式 (4.130)]

$$g\,T_2(\boldsymbol{M})=\sum_A T_{AA}(\boldsymbol{M})=\mathrm{Tr}\left\{\sum_A D^{\boldsymbol{M}}(I_A)D^{\boldsymbol{M}}(I_A)\right\}=d(\boldsymbol{M})C_2(\boldsymbol{M}) \quad (7.147)$$

其中, $d(\boldsymbol{M})$ 是表示 $\boldsymbol{M}$ 的维数. 对伴随表示, 由式 (7.19), $-T_{AB}(\boldsymbol{\omega})=g_{AB}$, $\boldsymbol{M}$ 等于李代数的最大根 $\boldsymbol{\omega}$. 因此, $-T_2(\boldsymbol{\omega})$ 就是单纯李代数负定的基林型所取的常数值, 有

$$g_{AB}=-\delta_{AB}T_2(\boldsymbol{\omega})=-\delta_{AB}C_2(\boldsymbol{\omega}) \quad (7.148)$$

附录 29 列出了单纯李代数的主要参数, 包括嘉当矩阵 A 和逆嘉当矩阵 A^{-1}, 素根, 正根和最大根 $\boldsymbol{\omega}$, 基本主权 $\boldsymbol{w}_\mu$, 由式 (7.145) 可算出表示 $\boldsymbol{M}$ 中的二阶卡西米尔不变量 $C_2(\boldsymbol{M})$, 由式 (7.148) 可算出基林型的常数值. 计算中规定长根半长度 $d=1$.

六、谢瓦莱基

在嘉当 - 外尔基中, $E_{\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}}$ 可表为 $E_{\boldsymbol{\alpha}}$ 和 $E_{\boldsymbol{\beta}}$ 的对易关系. 因此在计算生成元的表示矩阵时, 只需计算与素根相联系的生成元的表示矩阵, 由它们的对易关系可以得到所有其他生成元的表示矩阵. 为使形式更加对称, 谢瓦莱引入 3ℓ 个新基 E_μ, F_μ 和 H_μ, 称为谢瓦莱基

$$\begin{aligned} &d_\mu^{-1/2}E_{\boldsymbol{r}_\mu}\ \longrightarrow\ E_\mu\,, \qquad d_\mu^{-1/2}E_{-\boldsymbol{r}_\mu}\ \longrightarrow\ F_\mu \\ &d_\mu^{-1}\sum_{j=1}^{\ell}\ (\boldsymbol{r}_\mu)_j\,H_j\equiv d_\mu^{-1}\boldsymbol{r}_\mu\cdot\boldsymbol{H}\ \longrightarrow\ H_\mu \end{aligned} \quad (7.149)$$

引入谢瓦莱基后, 正则对易关系式 (7.42) 变成

$$
\begin{aligned}
&[H_\mu,\ H_\nu] = 0\ , && [H_\mu,\ E_\nu] = A_{\mu\nu}E_\nu, \\
&[H_\mu,\ F_\nu] = -A_{\mu\nu}F_\nu\ , && [E_\mu,\ F_\nu] = \delta_{\mu\nu}H_\mu
\end{aligned}
\tag{7.150}
$$

其中, $A_{\mu\nu} = (\mathbf{r}_\nu)_\mu$ 是嘉当矩阵. 此外注意到素根之差不是根, 素根之和形成根链

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{r}_\mu + n\boldsymbol{r}_\nu\ , && 0 \leqslant n \leqslant p, && \text{是根}, \\
&\boldsymbol{r}_\mu + (p+1)\boldsymbol{r}_\nu\ , && \text{不是根}, && p = -\Gamma\left(\boldsymbol{r}_\mu/\boldsymbol{r}_\nu\right) = -A_{\nu\mu}
\end{aligned}
$$

因而有塞尔 (Serre) 关系

$$
\begin{aligned}
&\underbrace{[E_\nu,\ [E_\nu,\ \cdots\ [E_\nu}_{1-A_{\nu\mu}},\ E_\mu]\ \cdots] = 0, \\
&\underbrace{[F_\nu,\ [F_\nu,\ \cdots\ [F_\nu}_{1-A_{\nu\mu}},\ F_\mu]\ \cdots] = 0
\end{aligned}
\tag{7.151}
$$

十分重要的是, 有相同下标 μ 的三个生成元, 正好满足 SU(2) 群生成元的对易关系. SU(2) 群的李代数是 A_1, 自身表示生成元取为 $E = T_+ = T_1 + \mathrm{i}T_2$, $F = T_- = T_1 - \mathrm{i}T_2$ 和 $H = 2T_3$,

$$
\begin{aligned}
&E = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, && F = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, && H = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \\
&[H,\ E] = 2E\ , && [H,\ F] = -2F\ , && [E,\ F] = H
\end{aligned}
\tag{7.152}
$$

现在的 E_μ, F_μ 和 H_μ 满足完全相同的对易关系

$$
[H_\mu,\ E_\mu] = 2E_\mu\ , \qquad [H_\mu,\ F_\mu] = -2F_\mu\ , \qquad [E_\mu,\ F_\mu] = H_\mu \tag{7.153}
$$

因而构成单纯李代数的 A_1 子李代数, 记作 $\mathcal{A}_\mu$. 在单纯李代数的一个不可约表示的表示空间里, 属子代数 $\mathcal{A}_\mu$ 的不可约表示的状态集合, 称为一个 $\mathcal{A}_\mu$ 多重态. 各种这样的多重态以复杂的方式架构起单纯李代数的不可约表示空间, 并由此可以计算出不可约表示空间的状态基和生成元表示矩阵. 这方法称为方块权图方法, 将在下节详细讨论.

7.6 方块权图方法

本节介绍用方块权图方法计算单纯李代数不可约表示空间的状态基和生成元的表示矩阵. 方法的核心是怎样把各种 $\mathcal{A}_\mu$ 多重态嵌入到单纯李代数的不可约表示空间中去. 由于存在重权, 这些多重态在李代数的不可约表示空间中互相交叉, 包含的状态基也不一定正交, 形成复杂的态势. 方块权图方法就是要理清这种复杂关系, 确定李代数的不可约表示空间中互相正交归一的状态基和谢瓦莱基的表示矩阵.

一、$\mathcal{A}_\mu$ 多重态

在第四章, A_1 李代数 [SU(2) 群] 的生成元取为 J_1, J_2 和 J_3, 不可约表示空间的状态基用 $|j,m\rangle$ 标记, $-j \leqslant m \leqslant j$:

$$J_3\ |j,m\rangle = m\ |j,m\rangle, \qquad (J_1 - \mathrm{i}J_-)\ |j,m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\ |j,m-1\rangle$$

现在为了与谢瓦莱基比较, 生成元改用 $E = J_1 + \mathrm{i}J_2$, $F = J_1 - \mathrm{i}J_2$ 和 $H = 2J_3$, 它们满足对易关系式 (7.152). 设 $M = 2j$ 和 $m = j - n$, 把状态基改写为

$$|j,j\rangle = |M,M\rangle, \qquad |j,m\rangle = |M,M-2n\rangle$$

则

$$\begin{aligned} &H\ |M,M-2n\rangle = (M-2n)\ |M,M-2n\rangle, \\ &F\ |M,M-2n\rangle = \sqrt{(M-n)(n+1)}\ |M,M-2n-2\rangle, \qquad 0 \leqslant n \leqslant M \\ &E\ |M,M-2n-2\rangle = \sqrt{(M-n)(n+1)}\ |M,M-2n\rangle, \end{aligned} \tag{7.154}$$

状态基 $|M,M-2n\rangle$ 是 H 的本征态. H 的表示矩阵是对角矩阵, 而 E 和 F 的表示矩阵互为转置.

对单纯李代数, 子李代数 $\mathcal{A}_\mu$ 生成元满足与式 (7.152) 相同的对易关系, 因而在单纯李代数不可约表示中, 它们对状态基也有类似的作用. 设在单纯李代数不可约表示 $\boldsymbol{M}$ 中, 状态基记作 $|\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}\rangle$, 它是 H_μ 的共同本征状态

$$H_\mu\ |\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}\rangle = m_\mu\ |\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}\rangle \tag{7.155}$$

降算符 F_μ 对这些状态基的作用, 使权 $\boldsymbol{m}$ 减少一个素根 $\boldsymbol{r}_\mu$. 按照 A_1 李代数多重态的规则式 (7.154), 我们可以在不可约表示 $\boldsymbol{M}$ 的表示空间中, 构造出 $\mathcal{A}_\mu$ 多重态来, 其基本方法如下. 在表示空间中, 如果状态基 $|\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}\rangle$ 满足下面条件, 即它在升算符 E_μ 作用下为零, 且权 $\boldsymbol{m}$ 包含正分量 $m_\mu > 0$,

$$E_\mu\ |\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}\rangle = 0, \qquad m_\mu > 0 \tag{7.156}$$

则在表示空间中存在一个 $\mathcal{A}_\mu$ 多重态, 重数为 $m_\mu + 1$

$$|\boldsymbol{M},\boldsymbol{m} - n\boldsymbol{r}_\mu\rangle, \qquad 0 \leqslant n \leqslant m_\mu \tag{7.157}$$

F_μ 和 E_μ 在这些状态基中的矩阵元为

$$\begin{aligned} &F_\mu\ |\boldsymbol{M},\boldsymbol{m} - n\boldsymbol{r}_\mu\rangle = \sqrt{(m_\mu - n)(n+1)}\ |\boldsymbol{M},\boldsymbol{m} - (n+1)\boldsymbol{r}_\mu\rangle, \\ &E_\mu\ |\boldsymbol{M},\boldsymbol{m} - (n+1)\boldsymbol{r}_\mu\rangle = \sqrt{(m_\mu - n)(n+1)}\ |\boldsymbol{M},\boldsymbol{m} - n\boldsymbol{r}_\mu\rangle \end{aligned} \tag{7.158}$$

F_μ 和 E_μ 的表示矩阵互为转置.

由于有不同权的状态基一定是互相正交的, 只要这些权都是单权, 这些状态基就可选作表示空间的正交归一的状态基. 如果这些权中存在重权, 就需要按一定的规则选定正交归一的状态基, 这种规则往往是让状态基符合某一个 $\mathcal{A}_\nu$ 多重态的要求, 而其他 $\mathcal{A}_\mu$ 多重态中包含的状态基 (7.157) 可能是这些选定的正交归一的状态基的适当线性组合.

二、正交归一的状态基

在单纯李代数的一个幺正不可约表示 $\boldsymbol{M}$ 的表示空间中, 状态基互相正交归一. 对单权 $\boldsymbol{m}$, 状态基记作 $|\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}\rangle$. 对 n 重权 $\boldsymbol{m}$, 正交归一的状态基用序数字区分, 记作 $|\boldsymbol{M},(\boldsymbol{m})_a\rangle$, $a=1,\ 2,\ \cdots,\ n$. 在不可约表示 $\boldsymbol{M}$ 的方块权图中, 每一个正交归一的状态基用一个方块代表. 一个方块就是填以权分量的一个方框. 权分量中如有负分量, 用上面带一横线的数字标记. 例如, 单权 $\boldsymbol{m}=-2\boldsymbol{w}_1+\boldsymbol{w}_2$ 的状态基用 $\boxed{\overline{2},1}$ 标记, 三重权 $\boldsymbol{m}=2\boldsymbol{w}_1-\boldsymbol{w}_2$ 的第二个状态基用 $\boxed{(2,\overline{1})_2}$ 标记.

在一个不可约表示中, 任何权为 $\boldsymbol{m}$ 的态都可由最高权态 $|\boldsymbol{M},\boldsymbol{M}\rangle$ 通过多次降算符的作用得到. 因此最高权 $\boldsymbol{M}$ 和表示中的任何权 $\boldsymbol{m}$ 之差一定可以表为素根之和

$$\boldsymbol{M}-\boldsymbol{m}=\sum_{\mu=1}^{\ell} C_\mu \boldsymbol{r}_\mu\ , \qquad h(\boldsymbol{M},\boldsymbol{m})=\sum_{\mu=1}^{\ell} C_\mu \tag{7.159}$$

$h(\boldsymbol{M},\boldsymbol{m})$ 称为在不可约表示 $\boldsymbol{M}$ 中权 $\boldsymbol{m}$ 的高度. 最高权的高度为零.

在方块权图中, 最高权 $\boldsymbol{M}$ 是单权, 最高权态的方块排在第一行, 高度为一的权态对应的方块排在第二行, 高度为二的权态对应的方块排在第三行, 依此类推. 同一行的方块对应的权高度都相等. 只有相邻行的方块, 它们对应的状态基才可能通过某一个降算符 F_μ(或升算符 E_μ) 联系起来. 在方块权图中这样的方块用一定的线连接起来. 例如, 由降算符 F_1 相联系的方块用单线连接, 由降算符 F_2 相联系的方块用双线连接等. 每一个 $\mathcal{A}_\mu$ 多重态对应的方块都"竖直地"嵌入方块权图中, 相邻状态基的方块排在相邻的行. 对重权, $\mathcal{A}_\mu$ 多重态中有的状态可能是若干选定的正交归一的状态基的线性组合, 在方块权图中就表现为若干方块的组合.

对单纯李代数的给定不可约表示 $\boldsymbol{M}$, 先画出最高权态的方块. 然后从最高权开始, 凡见到有正分量 $m_\mu>0$ 的权, 如果它的状态在 E_μ 作用下为零, 则按照构造 $\mathcal{A}_\mu$ 多重态的基本方法, 在方块权图中嵌入一个 $\mathcal{A}_\mu$ 多重态. 在一个 $\mathcal{A}_\mu$ 多重态中, 有的权可能包含其他正分量 (例如 ν 分量), 由它又可产生新的 $\mathcal{A}_\nu$ 多重态. 最高权是单权, 与最高权等价的权是单权, 与最高权态同属一个 $\mathcal{A}_\mu$ 多重态的状态的权也是单权. 由最高权 $\boldsymbol{M}$ 的状态出发, 通过若干多重态到达某一个权为 $\boldsymbol{m}$ 的状态, 称为权 $\boldsymbol{m}$ 的一条路径. 只有一条路径的权也是单权, 而有几条不同路径的权就可能

是重权. 例如, 由最高权态出发, 先经过 $\mathcal{A}_\mu$ 多重态, 再经过 $\mathcal{A}_\nu$ 多重态到达权为 $\boldsymbol{m}$ 的态, 同时, 由最高权态出发, 先经过 $\mathcal{A}_\nu$ 多重态, 再经过 $\mathcal{A}_\mu$ 多重态也可以到达权为 $\boldsymbol{m}$ 的态. 这样, 权 $\boldsymbol{m}$ 有两条路径, 沿不同路径到达的两个权为 $\boldsymbol{m}$ 的态不一定重合, 因而权 $\boldsymbol{m}$ 可能是二重权, 在方块权图中就要画两个权为 $\boldsymbol{m}$ 的方块, 然后用下一小节的方法确定是单权还是二重权.

方块权图中高度最大的权, 它的所有分量都非正, 称为最低权 $\boldsymbol{N}$. 任何降算符作用在最低权态上都得零. 最低权取负值就是另一个表示的最高权, 这表示正是原表示的复共轭表示: $-\boldsymbol{N}=\boldsymbol{M}^*$. 这里的 $\boldsymbol{M}^*$ 是表示 $D^{\boldsymbol{M}}$ 的复共轭表示的简写. 按照幺正表示生成元的定义

$$
\begin{gathered}
D(R)^* = \mathbf{1} - \mathrm{i}\sum_A \omega_A D(I_A)' = \mathbf{1} - \mathrm{i}\sum_A \omega_A \left\{-D(I_A)^*\right\} \\
D(I_A)' = -D(I_A)^* = -D(I_A)^T
\end{gathered}
$$

可知在复共轭表示中生成元谢瓦莱基的表示矩阵为

$$
\begin{aligned}
&D(H_\mu)' = -D(H_\mu), &&H_\mu \left|\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}\right\rangle^* = -m_\mu \left|\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}\right\rangle^* \\
&D(E_\mu)' = -D(F_\mu), &&E_\mu \left|\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}\right\rangle^* = -\sum_{\boldsymbol{m}'=\boldsymbol{m}-\boldsymbol{r}_\mu} D^{\boldsymbol{M}}_{\boldsymbol{m}',\boldsymbol{m}}(F_\mu) \left|\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}'\right\rangle^* \\
&D(F_\mu)' = -D(E_\mu), &&F_\mu \left|\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}\right\rangle^* = -\sum_{\boldsymbol{m}'=\boldsymbol{m}+\boldsymbol{r}_\mu} D^{\boldsymbol{M}}_{\boldsymbol{m}',\boldsymbol{m}}(E_\mu) \left|\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}'\right\rangle^*
\end{aligned}
$$

式中对重权的不同状态求和. 可取复共轭表示 $\boldsymbol{M}^*$ 的基为

$$
\left|\boldsymbol{M}^*,-\boldsymbol{m}\right\rangle = (-1)^{h(\boldsymbol{M},\boldsymbol{m})} \left|\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}\right\rangle^* \tag{7.160}
$$

则

$$
D^{\boldsymbol{M}^*}_{-\boldsymbol{m}+\boldsymbol{r}_\mu,-\boldsymbol{m}}(E_\mu) = D^{\boldsymbol{M}}_{\boldsymbol{m}-\boldsymbol{r}_\mu,\boldsymbol{m}}(F_\mu), \qquad D^{\boldsymbol{M}^*}_{-\boldsymbol{m}-\boldsymbol{r}_\mu,-\boldsymbol{m}}(F_\mu) = D^{\boldsymbol{M}}_{\boldsymbol{m}+\boldsymbol{r}_\mu,\boldsymbol{m}}(E_\mu) \tag{7.161}
$$

可见互为复共轭的两表示的方块权图互为倒置, 对应的状态权互差负号.

三、重权重数的确定

在单纯李代数的一个不可约表示 $\boldsymbol{M}$ 中, 每一个权都等价于一个主权, 它们的重数由主权的重数确定. 因为主权没有负分量, 所以在等价的权中, 主权的高度最小. 方块权图里对应等价权的一组方块中, 对应主权的方块排在最上面, 在画方块权图时它出现得最早. 可用下面方法确定主权的重数, 同时也就定出了与之等价的权的重数.

在方块权图中, 一旦出现主权的方块, 首先根据由最高权降到此主权的路径数, 定出该主权对应的方块数. 属此主权的正交归一的状态基通常按某一个或几个 $\mathcal{A}_\nu$ 多重态的要求来选定, 然后由谢瓦莱基的对易关系式 (7.150) 计算相应生成元的表示矩阵元素, 其中主要是

$$E_\mu F_\mu = F_\mu E_\mu + H_\mu, \qquad E_\mu F_\nu = F_\nu E_\mu, \qquad \mu \neq \nu \tag{7.162}$$

式 (7.158) 也满足式 (7.162). 方块权图中每一方块的所有连线对应的矩阵元都必须满足式 (7.162). 如果发现有一个方块与所有它上面的方块的连线的矩阵元都为零, 则说明此状态不能由最高权态用降算符的作用产生, 根据表示的不可约性, 这状态应该不存在. 用这办法可最后确定该主权的重数. 特殊情况下, 由于状态基选得不好, 还要检查有没有状态基的线性组合不能由最高权态用降算符的作用产生. 但只要状态基是按一个或几个 $\mathcal{A}_\nu$ 多重态来选定, 这种情况就不会出现.

四、画方块权图的方法

根据前面的讨论, 小结一下画方块权图的方法. 对给定单纯李代数的给定不可约表示 $\boldsymbol{M}$, 按下面步骤自上而下画出方块权图.

(1) 根据单纯李代数的嘉当矩阵 $A_{\nu\mu}$, 由式 (7.141) 算出素根 $\boldsymbol{r}_\mu$ 关于基本主权 $\boldsymbol{w}_\nu$ 的展开式.

(2) 按等价关系式 (7.142) 计算所有与最高权等价的权.

(3) 方块权图的第一行是最高权态对应的方块. 对最高权的每一个正分量 m_μ, 构造相应的 $\mathcal{A}_\mu$ 多重态. 两相邻方块用与 F_μ 相对应的连线 (如实线, 虚线或 μ 重线等) 来连接, 它们的权之差等于素根 $\boldsymbol{r}_\mu$, F_μ 的矩阵元由式 (7.158) 计算.

(4) 对方块权图中新出现的权, 如包含有正分量 m_ν, 且对应状态基在 E_ν 作用下为零 [条件式 (7.156)], 就构造相应的 $\mathcal{A}_\nu$ 多重态.

(5) 当不同的多重态中出现相同的权时, 若此权不是主权, 则根据它等价的主权确定其重数, 若此权是主权, 则根据由最高权降到此权的路径数, 初步确定为此主权的重数. 对每一个权, 用适当方式定义与重数相同个数的正交归一的状态基, 分别对应方块权图中一个方块.

(6) 根据式 (7.158) 或 (7.162) 计算方块权图中已出现连线的矩阵元, 并把矩阵元标在连线旁. 因为升算符 E_μ 的表示矩阵是降算符 F_μ 表示矩阵的转置, 所以连线旁注上的矩阵元同时也是升算符的矩阵元. 撤消矩阵元为零的连线. 矩阵元为 1 时数字经常省略. 检查每一个对应主权的方块, 如发现有方块与它上面的所有方块没有连线相连, 则移去此方块, 从而确定该主权的重数. 按等价关系式 (7.142) 计算所有与此主权等价的权, 它们有相同的重数. 按此方法画方块权图, 一直到构造不出新的 $\mathcal{A}_\nu$ 多重态为止.

(7) 不可约表示的最低权改负号就是复共轭表示的最高权. 互为复共轭表示的方块权图互相上下颠倒, 对应的状态基可由式 (7.160) 相联系, 权矢量互差负号, 升或降算符的表示矩阵元由式 (7.161) 计算.

(8) 在画方块权图过程中一旦出现错误, 就会影响后面的计算, 因而要随时做检查. 检查用 F_μ 连线连接的两方块的权之差是不是等于素根 $\mathbf{r}_\mu$, 检查对每个方块的连线式 (7.162) 是否成立, 检查等价的权重数是否相同, 检查每一高度包含的方块数目, 随高度增加, 是否先增加, 后减少, 对称地形成一个纺锤形. 检查方块权图的上下对称性经常是检查方块权图错误的一个重要方面.

有一本书 (文献 [13]) 详细列出了各单纯李代数不等价不可约表示的各种重要参数, 如表示维数, 表示包含的最大高度数 (称为级数), 表示中包含的各主权的重数, 每个主权的外尔轨道长度等, 这对计算生成元的表示矩阵, 以及以后计算克莱布施 - 戈登系数大有帮助.

我们将通过例子来说明方块权图的画法.

五、A_2 李代数几个表示的方块权图

SU(3) 群的李代数是 A_2, 它在物理中有广泛应用. A_2 李代数的嘉当矩阵和素根展开式为

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}, \qquad \begin{aligned} \boldsymbol{r}_1 &= 2\boldsymbol{w}_1 - \boldsymbol{w}_2, \\ \boldsymbol{r}_2 &= -\boldsymbol{w}_1 + 2\boldsymbol{w}_2. \end{aligned}$$

先画基本表示的方块权图. (1,0) 表示的最高权第一个分量为正, 由它可构造一个 $\mathcal{A}_1$ 二重态

$$F_1 \left|(1,0),(1,0)\right\rangle = \left|(1,0),(\overline{1},1)\right\rangle$$

F_1 作用前后, 权相差 $\boldsymbol{r}_1$. 新状态的第二分量为正, 而且在 E_2 作用下为零, 由它可构造一个 $\mathcal{A}_2$ 二重态

$$F_2 \left|(1,0),(\overline{1},1)\right\rangle = \left|(1,0),(0,\overline{1})\right\rangle$$

F_2 作用前后, 权相差 $\boldsymbol{r}_2$. 新状态 $(0,\overline{1})$ 不包含正分量, 不能产生新的多重态. (1,0) 表示是 SU(3) 群的自身表示, 它包含三个互相外尔等价的状态, 都对应单权. (1,0) 表示的最低权是 $(0,\overline{1})$, 改符号后得 SU(3) 群自身表示的复共轭表示, 最高权为 (0,1). (1,0) 和 (0,1) 是 SU(3) 群两个基本表示. 图 7.3 (a) 和 (b) 给出它们的方块权图. 所有降算符的非零矩阵元都是 1, 在图中省略. 上面给出的 F_1 和 F_2 对状态基的作用公式是表达降算符非零表示矩阵元的一种常用方式. 状态基都是 H_μ 的本征状态, H_μ 的表示矩阵由式 (7.155) 给出, 不需要专门列出.

再画表示 (3,0) 的方块权图. 由式 (7.142) 计算与最高权 (3,0) 等价的权

$$(3,0) \xrightarrow{\boldsymbol{r}_1} (\overline{3},3) \xrightarrow{\boldsymbol{r}_2} (0,\overline{3}) \tag{7.163}$$

最高权的第一个分量为正, 由它可以构造一个 $\mathcal{A}_1$ 四重态

$$\begin{aligned} F_1\ |(3,0),(3,0)\rangle &= \sqrt{3}\ |(3,0),(1,1)\rangle \\ F_1\ |(3,0),(1,1)\rangle &= 2\ |(3,0),(\overline{1},2)\rangle \\ F_1\ |(3,0),(\overline{1},2)\rangle &= \sqrt{3}\ |(3,0),(\overline{3},3)\rangle \end{aligned} \tag{7.164}$$

$(1,1)$ 是主权, 它在表示 $(3,0)$ 中不是最高权. 主权 $(1,1)$ 与最高权 $(3,0)$ 同处于一个 $\mathcal{A}_1$ 多重态中, 因而也是单权. 与主权 $(1,1)$ 等价的权也都是单权, 它们是

$$(1,1)\ \begin{matrix} \xrightarrow{r_1} & (\overline{1},2) & \xrightarrow{r_2} & (1,\overline{2}) & \xrightarrow{r_1} \\ \xrightarrow{r_2} & (2,\overline{1}) & \xrightarrow{r_1} & (\overline{2},1) & \xrightarrow{r_2} \end{matrix}\ (\overline{1},\overline{1}) \tag{7.165}$$

由于 $\mathcal{A}_1$ 四重态后三个权的第二分量都为正 [见式 (7.164)], 由它们可分别构造 $\mathcal{A}_2$ 的二重态, 三重态和四重态

$$\begin{aligned} &F_2\ |(3,0),(1,1)\rangle = |(3,0),(2,\overline{1})\rangle, && F_2\ |(3,0),(\overline{1},2)\rangle = \sqrt{2}\ |(3,0),(0,0)\rangle \\ &F_2\ |(3,0),(0,0)\rangle = \sqrt{2}\ |(3,0),(1,\overline{2})\rangle, && F_2\ |(3,0),(\overline{3},3)\rangle = \sqrt{3}\ |(3,0),(\overline{2},1)\rangle \\ &F_2\ |(3,0),(\overline{2},1)\rangle = 2\ |(3,0),(\overline{1},\overline{1})\rangle, && F_2\ |(3,0),(\overline{1},\overline{1})\rangle = \sqrt{3}\ |(3,0),(0,\overline{3})\rangle \end{aligned} \tag{7.166}$$

由于权 $(2,\overline{1})$ 的第一分量为正, 而且 E_1 作用在该状态基上得零, 可以由它构造一个 $\mathcal{A}_1$ 三重态, 后两个状态的权为 $(0,0)$ 和 $(\overline{2},1)$. $(0,0)$ 是主权, 而且可从最高权通过两条不同路径到达, 因而有可能是二重权. 设两个 $(0,0)$ 状态基按 $\mathcal{A}_2$ 多重态来区分, 式 (7.166) 中的 $|(3,0),(0,0)\rangle$ 应改成 $|(3,0),(0,0)_1\rangle$, 属 $\mathcal{A}_2$ 三重态, 而 $|(3,0),(0,0)_2\rangle$ 属 $\mathcal{A}_2$ 单态

$$E_2\ |(3,0),(0,0)_2\rangle = F_2\ |(3,0),(0,0)_2\rangle = 0$$

这样, 新的 $\mathcal{A}_1$ 三重态中出现的 $(0,0)$ 状态就一般是两个状态基的线性组合

$$F_1\ |(3,0),(2,\overline{1})\rangle = a_1\ |(3,0),(0,0)_1\rangle + a_2\ |(3,0),(0,0)_2\rangle, \qquad a_1^2 + a_2^2 = 2$$

利用式 (7.162) 得

$$\begin{aligned} &E_2F_1\ |(3,0),(2,\overline{1})\rangle = a_1\sqrt{2}\ |(3,0),(\overline{1},2)\rangle \\ &= F_1E_2\ |(3,0),(2,\overline{1})\rangle = F_1\ |(3,0),(1,1)\rangle = 2\ |(3,0),(\overline{1},2)\rangle \end{aligned}$$

解得 $a_1 = \sqrt{2}$ 和 $a_2 = \sqrt{2 - a_1^2} = 0$. 状态基 $|(3,0),(0,0)_2\rangle$ 与前面的状态基联系的矩阵元都为零, 可见它在不可约表示 $(3,0)$ 中并不存在. 在表示 $(3,0)$ 中权 $(0,0)$ 应该是单权. 式 (7.166) 中权为 $(0,0)$ 的状态基仍应记作 $|(3,0),(0,0)\rangle$. 表示 $(3,0)$ 中包含的三个主权 $(3,0)$, $(1,1)$ 和 $(0,0)$ 都是单权, 因而其他权也都是单权.

由权 $(2,\bar{1})$ 和 $(1,\bar{2})$ 构造 $\mathcal{A}_1$ 三重态和二重态为

$$\begin{aligned} F_1\ |(3,0),(2,\bar{1})\rangle &= \sqrt{2}\ |(3,0),(0,0)\rangle, \\ F_1\ |(3,0),(0,0)\rangle &= \sqrt{2}\ |(3,0),(\bar{2},1)\rangle, \\ F_1\ |(3,0),(1,\bar{2})\rangle &= |(3,0),(\bar{1},\bar{1})\rangle \end{aligned} \tag{7.167}$$

降算符的所有不为零的矩阵元素列于式 (7.164)、(7.166) 和 (7.167) 中, 也标出在图 7.3 (d) 中. 这样就完成了表示 (3,0) 的方块权图. 表示 (0,3) 是表示 (3,0) 的复共轭表示, 方块权图的画法十分类似, 不再解释.

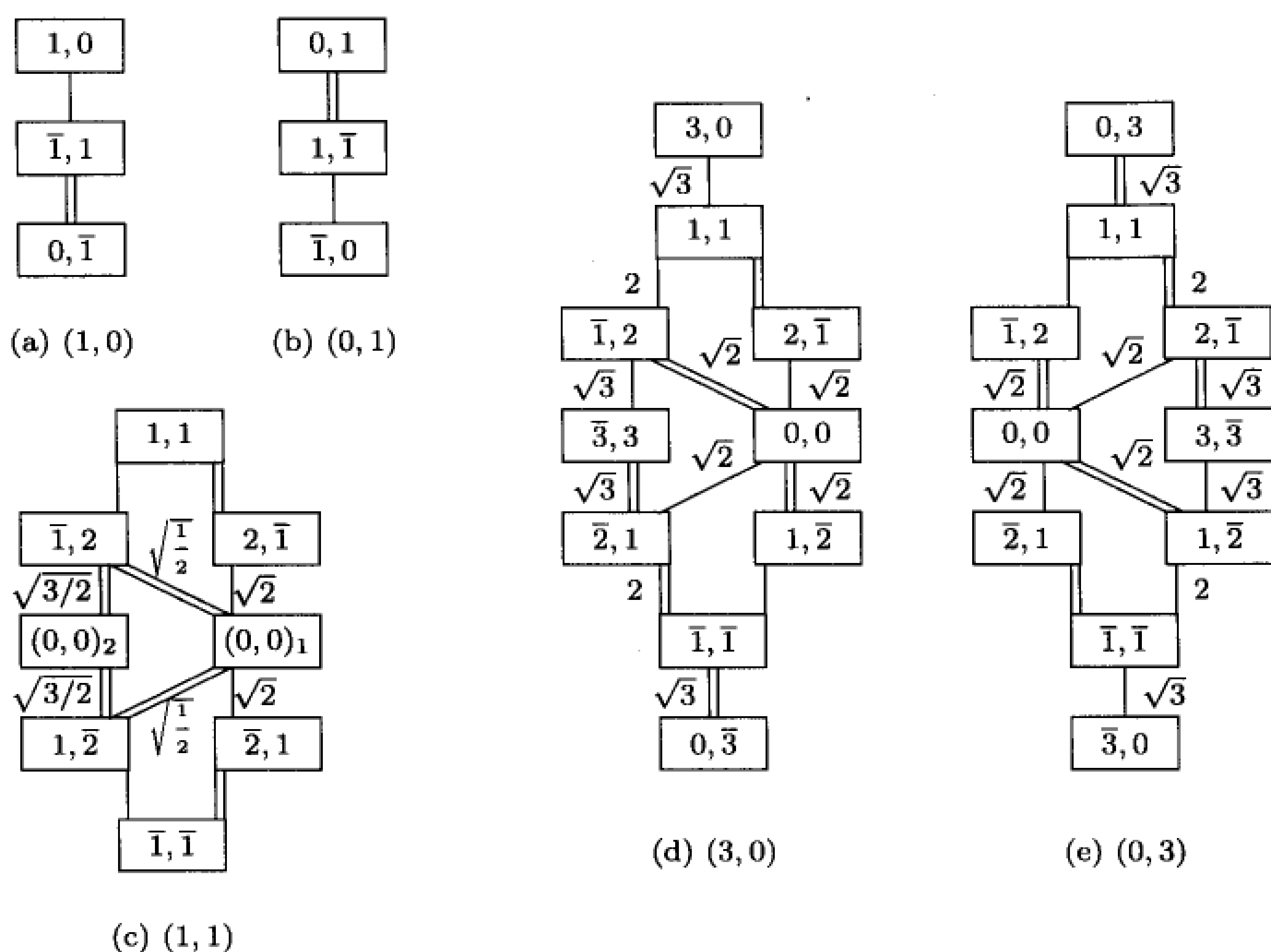


图 7.3　A_2 李代数几个表示的方块权图

最后画 A_2 李代数伴随表示 (1,1) 的方块权图. 最高权的两个分量都是正的, 由它可构造一个 $\mathcal{A}_1$ 多重态和一个 $\mathcal{A}_2$ 多重态

$$F_1\ |(1,1),(1,1)\rangle = |(1,1),(\bar{1},2)\rangle, \qquad F_2\ |(1,1),(1,1)\rangle = |(1,1),(2,\bar{1})\rangle \tag{7.168}$$

新产生的两个状态的权都包含正分量, 构造的多重态中都包含主权 (0,0) 的态, 因而主权 (0,0) 可能是二重权. 按 $\mathcal{A}_1$ 多重态来定义这两个状态基, $|(1,1),(0,0)_1\rangle$ 属

$\mathcal{A}_1$ 三重态, $|(1,1),(0,0)_2\rangle$ 属 $\mathcal{A}_1$ 单态

$$\begin{aligned}
&F_1\ |(1,1),(2,\overline{1})\rangle = \sqrt{2}\ |(1,1),(0,0)_1\rangle, \qquad F_1\ |(1,1),(0,0)_1\rangle = \sqrt{2}\ |(1,1),(\overline{2},1)\rangle,\\
&E_1\ |(1,1),(0,0)_2\rangle = F_1\ |(1,1),(0,0)_2\rangle = 0,\\
&F_2\ |(1,1),(\overline{1},2)\rangle = b_1\ |(1,1),(0,0)_1\rangle + b_2\ |(1,1),(0,0)_2\rangle, \qquad b_1^2+b_2^2=2,\\
&F_2\ |(1,1),(0,0)_1\rangle = b_3\ |(1,1),(1,\overline{2})\rangle, \qquad F_2\ |(1,1),(0,0)_2\rangle = b_4\ |(1,1),(1,\overline{2})\rangle
\end{aligned} \tag{7.169}$$

利用式 (7.162) 得

$$\begin{aligned}
&E_1F_2\ |(1,1),(\overline{1},2)\rangle = b_1\sqrt{2}\ |(1,1),(2,\overline{1})\rangle\\
&= F_2E_1\ |(1,1),(\overline{1},2)\rangle = F_2\ |(1,1),(1,1)\rangle = |(1,1),(2,\overline{1})\rangle
\end{aligned}$$

解得 $b_1=\sqrt{1/2}$. 选择 $|(1,1),(0,0)_2\rangle$ 的相位使 b_2 是正实数, 解得 $b_2=\sqrt{2-b_1^2}=\sqrt{3/2}$. 再用式 (7.162)

$$\begin{aligned}
&E_2F_2\ |(1,1),(0,0)_1\rangle = b_3^2\ |(1,1),((0,0)_1\rangle + b_3b_4\ |(1,1),((0,0)_2\rangle\\
&= (F_2E_2+H_2)\ |(1,1),(0,0)_1\rangle = (1/2)\ |(1,1),((0,0)_1\rangle + \sqrt{3/4}\ |(1,1),((0,0)_2\rangle
\end{aligned}$$

选择 $|(1,1),(1,\overline{2})\rangle$ 的相位使 b_3 是正实数, 解得 $b_3=\sqrt{1/2}$, 然后得 $b_4=\sqrt{3/2}$. 这样, $(1,1)$ 表示包含两个主权, 最高权 $(1,1)$ 是单权, 权 $(0,0)$ 是二重权. 余下的是由权 $(\overline{2},1)$ 和 $(1,\overline{2})$ 构造的 $\mathcal{A}_2$ 多重态和 $\mathcal{A}_1$ 多重态

$$F_2\ |(1,1),(\overline{2},1)\rangle = |(1,1),(\overline{1},\overline{1})\rangle, \qquad F_1\ |(1,1),(1,\overline{2})\rangle = |(1,1),(\overline{1},\overline{1})\rangle \tag{7.170}$$

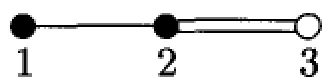
式 (7.168)~(7.170) 给出 $(1,1)$ 表示降算符全部不为零矩阵元, 这些矩阵元也标记在图 7.3 上. 最低权 $(\overline{1},\overline{1})$ 与最高权仅差负号, 因而伴随表示是自共轭表示.

$(1,1)$ 表示是 A_2 李代数的伴随表示, 它的方块权图上半部的权也是 A_2 李代数的正根

$$\boldsymbol{w}_1+\boldsymbol{w}_2=\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{r}_2, \qquad 2\boldsymbol{w}_1-\boldsymbol{w}_2=\boldsymbol{r}_1, \qquad -\boldsymbol{w}_1+2\boldsymbol{w}_2=\boldsymbol{r}_2 \tag{7.171}$$

* 六、C_3 李代数基本表示的方块权图

C_3 李代数的邓金图和嘉当矩阵如下:

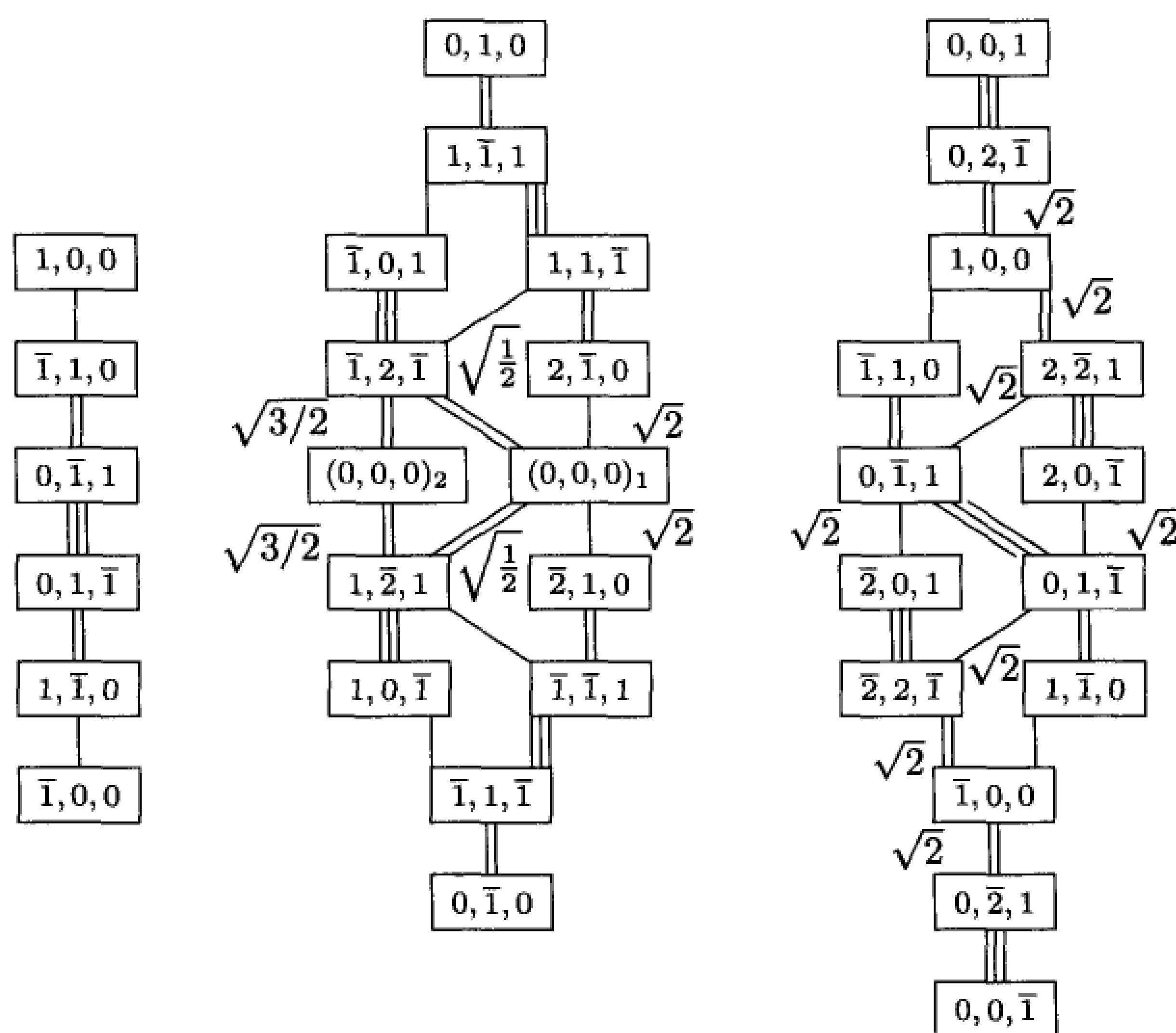


$$A=\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0\\ -1 & 2 & -2\\ 0 & -1 & 2\end{pmatrix}$$

素根和基本主权的关系是

$$\boldsymbol{r}_1=2\boldsymbol{w}_1-\boldsymbol{w}_2\ , \qquad \boldsymbol{r}_2=-\boldsymbol{w}_1+2\boldsymbol{w}_2-\boldsymbol{w}_3\ , \qquad \boldsymbol{r}_3=-2\boldsymbol{w}_2+2\boldsymbol{w}_3 \tag{7.172}$$

现在我们画 C_3 李代数的三个基本表示的方块权图 (见图 7.4). 先画 $(1,0,0)$ 表示的方块权图. 与最高权等价的权都是单权, 有



(1) 表示 $(1,0,0)$ (2) 表示 $(0,1,0)$ (3) 表示 $(0,0,1)$

图 7.4 单纯李代数 C_3 基本表示的方块权图

$$(1,0,0) \xrightarrow{r_1} (\bar{1},1,0) \xrightarrow{r_2} (0,\bar{1},1) \xrightarrow{r_3} (0,1,\bar{1}) \xrightarrow{r_2} (1,\bar{1},0) \xrightarrow{r_1} (\bar{1},0,0) \tag{7.173}$$

最高权的第一个分量为 1, 由它可构造出一个 $\mathcal{A}_1$ 二重态, 得权 $(\bar{1},1,0)$. 由权 $(\bar{1},1,0)$ 构造出一个 $\mathcal{A}_2$ 二重态, 得权 $(0,\bar{1},1)$. 由权 $(0,\bar{1},1)$ 构造出一个 $\mathcal{A}_3$ 二重态, 得权 $(0,1,\bar{1})$. 由权 $(0,1,\bar{1})$ 构造出一个 $\mathcal{A}_2$ 二重态, 得权 $(1,\bar{1},0)$. 最后, 由权 $(1,\bar{1},0)$ 构造出一个 $\mathcal{A}_1$ 二重态, 得权 $(\bar{1},0,0)$. 权 $(\bar{1},0,0)$ 的全部分量都非正, 不能再构造出新的多重态, 方块权图画完. 表示 $(1,0,0)$ 中只有一个主权, 也就是最高权, 因而表示 $(1,0,0)$ 是六维表示, 六个权都互相等价, 无重权. 它就是 USp(6) 群的自身表示. 这里和以后, 为了节省篇幅, 在写降算符 F_μ 的非零矩阵元时, 省略状态基 $|\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}\rangle$ 中的 $\boldsymbol{M}$

$$\begin{aligned}
&F_1\,|1,0,0\rangle = |\bar{1},1,0\rangle\,, \qquad F_2\,|\bar{1},1,0\rangle = |0,\bar{1},1\rangle, \\
&F_3\,|0,\bar{1},1\rangle = |0,1,\bar{1}\rangle\,, \qquad F_2\,|0,1,\bar{1}\rangle = |1,\bar{1},0\rangle, \\
&F_1\,|1,\bar{1},0\rangle = |\bar{1},0,0\rangle
\end{aligned} \tag{7.174}$$

其次, 画 $(0,1,0)$ 表示的方块权图. 有 12 个权与最高权等价

$$\begin{array}{cccccc} (0,1,0), & (1,\bar{1},1), & (\bar{1},0,1), & (1,1,\bar{1}), & (\bar{1},2,\bar{1}), & (2,\bar{1},0) \\ (1,\bar{2},1), & (\bar{2},1,0), & (1,0,\bar{1}), & (\bar{1},\bar{1},1), & (\bar{1},1,\bar{1}), & (0,\bar{1},0) \end{array} \tag{7.175}$$

最高权的第二个分量为 1, 由它可构造出一个 $\mathcal{A}_2$ 二重态

$$F_2\ |0,1,0\rangle = |1,\bar{1},1\rangle$$

权 $(1,\bar{1},1)$ 中包含两个正分量, 可构造两个二重态

$$F_1\ |1,\bar{1},1\rangle = |\bar{1},0,1\rangle, \qquad F_3\ |1,\bar{1},1\rangle = |1,1,\bar{1}\rangle$$

由新产生的权, 又可以构造新的多重态

$$F_3\ |\bar{1},0,1\rangle = |\bar{1},2,\bar{1}\rangle, \qquad F_1\ |1,1,\bar{1}\rangle = |\bar{1},2,\bar{1}\rangle, \qquad F_2\ |1,1,\bar{1}\rangle = |2,\bar{1},0\rangle$$

到现在为止, 所有产生的权都与最高权等价, 因而都是单权. 特别是 F_3 作用在状态基 $|\bar{1},0,1\rangle$ 上得到的状态基 $|\bar{1},2,\bar{1}\rangle$, 和 F_1 作用在状态基 $|1,1,\bar{1}\rangle$ 上得到的状态基 $|\bar{1},2,\bar{1}\rangle$, 必须是同一个基. 一般说来, 在画方块权图时, 只要还没有出现主权, 或者出现的主权也是单权, 则所有其他权都是单权. 一旦出现有重权的主权, 才需要注意与它等价的权也是重权.

由权 $(\bar{1},2,\bar{1})$ 和 $(2,\bar{1},0)$ 分别构造两个三重态都会出现主权 $(0,0,0)$. 有两个理由可以确定零权是二重权: 一是它由两条不同的路径产生, 它们很可能不重合. 二是在高度为 4 的权中只有零权, 高度为 4 的状态基数不应该少于高度为 3 的状态基数. 现在按 $\mathcal{A}_1$ 多重态来定义零权的状态基, $|(0,0,0)_1\rangle$ 属 $\mathcal{A}_1$ 三重态, $|(0,0,0)_2\rangle$ 属 $\mathcal{A}_1$ 单态, 而 F_2 对 $|\bar{1},2,\bar{1}\rangle$ 的作用得到的零权态只能是它们的组合

$$\begin{aligned}
&F_1\ |2,\bar{1},0\rangle = \sqrt{2}\ |(0,0,0)_1\rangle\ , \qquad F_1\ |(0,0,0)_1\rangle = \sqrt{2}\ |\bar{2},1,0\rangle, \\
&E_1\ |(0,0,0)_2\rangle = F_1\ |(0,0,0)_2\rangle = 0, \\
&F_2\ |\bar{1},2,\bar{1}\rangle = a_1\ |(0,0,0)_1\rangle + a_2\ |(0,0,0)_2\rangle\ , \qquad a_1^2 + a_2^2 = 2, \\
&F_2\ |(0,0,0)_1\rangle = a_3\ |1,\bar{2},1\rangle, \qquad F_2\ |(0,0,0)_2\rangle = a_4\ |1,\bar{2},1\rangle
\end{aligned}$$

按式 (7.162),

$$E_1F_2\ |\bar{1},2,\bar{1}\rangle = a_1\sqrt{2}\ |2,\bar{1},0\rangle = F_2E_1\ |\bar{1},2,\bar{1}\rangle = \ |2,\bar{1},0\rangle$$

定出 $a_1 = \sqrt{1/2}$. 选择状态基 $|(0,0,0)_2\rangle$ 的相位使 a_2 是正实数, 得 $a_2 = \sqrt{2-a_1^2} = \sqrt{3/2}$. 再用式 (7.162),

$$\begin{aligned}
&E_2F_2\ |(0,0,0)_1\rangle = a_3^2\ |(0,0,0)_1\rangle + a_3a_4\ |(0,0,0)_2\rangle \\
&= (F_2E_2 + H_2)\ \ |(0,0,0)_1\rangle = (1/2)\ |(0,0,0)_1\rangle + \sqrt{3/4}\ |(0,0,0)_2\rangle
\end{aligned}$$

选择状态基 $|(1,\overline{2},1)\rangle$ 的相位使 a_3 是正实数, 定出 $a_3=\sqrt{1/2}$, 解得 $a_4=\sqrt{3/2}$. 方块权图的下面一半与上面对称, 计算很类似, 结果列于下面公式中, 也标记在方块权图上.

$$F_1\ |1,\overline{2},1\rangle=|\overline{1},\overline{1},1\rangle\ ,\qquad F_3\ |1,\overline{2},1\rangle=|1,0,\overline{1}\rangle$$

$$F_2\ |\overline{2},1,0\rangle=|\overline{1},\overline{1},1\rangle\ ,\qquad F_3\ |\overline{1},\overline{1},1\rangle=|\overline{1},1,\overline{1}\rangle$$

$$F_1\ |1,0,\overline{1}\rangle=|\overline{1},1,\overline{1}\rangle,\qquad F_2\ |\overline{1},1,\overline{1}\rangle=|0,\overline{1},0\rangle$$

表示 $(0,1,0)$ 是 14 维自共轭表示, 有两个主权, 零权是二重权.

最后画 $(0,0,1)$ 表示的方块权图. 这表示中有两个主权 $(0,0,1)$ 和 $(1,0,0)$, 主权 $(1,0,0)$ 由最高权 $(0,0,1)$ 通过一条路径降下来, 因而也是单权. $(1,0,0)$ 的等价权已由式 (7.173) 给出, $(0,0,1)$ 的等价权是

$$\begin{array}{cccc}(0,0,1)\ , & (0,2,\overline{1})\ , & (2,\overline{2},1)\ , & (2,0,\overline{1}),\\ (\overline{2},0,1)\ , & (\overline{2},2,\overline{1})\ , & (0,\overline{2},1)\ , & (0,0,\overline{1})\end{array} \tag{7.176}$$

下面列出降算符的非零矩阵元

$$F_3\ |0,0,1\rangle=\ |0,2,\overline{1}\rangle\ ,\qquad F_2\ |0,2,\overline{1}\rangle=\sqrt{2}\ |1,0,0\rangle,$$

$$F_2\ |1,0,0\rangle=\sqrt{2}\ |2,\overline{2},1\rangle\ ,\qquad F_1\ |1,0,0\rangle=\ |\overline{1},1,0\rangle,$$

$$F_2\ |\overline{1},1,0\rangle=\ |0,\overline{1},1\rangle\ ,\qquad F_1\ |2,\overline{2},1\rangle=\sqrt{2}\ |0,\overline{1},1\rangle,$$

$$F_1\ |0,\overline{1},1\rangle=\sqrt{2}\ |\overline{2},0,1\rangle\ ,\qquad F_3\ |2,\overline{2},1\rangle=\ |2,0,\overline{1}\rangle,$$

$$F_1\ |2,0,\overline{1}\rangle=\sqrt{2}\ |0,1,\overline{1}\rangle\ ,\qquad F_1\ |0,1,\overline{1}\rangle=\sqrt{2}\ |\overline{2},2,\overline{1}\rangle,$$

$$F_3\ |0,\overline{1},1\rangle=\ |0,1,\overline{1}\rangle\ ,\qquad F_3\ |\overline{2},0,1\rangle=\ |\overline{2},2,\overline{1}\rangle,$$

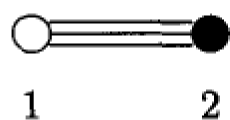
$$F_2\ |0,1,\overline{1}\rangle=\ |1,\overline{1},0\rangle\ ,\qquad F_1\ |1,\overline{1},0\rangle=\ |\overline{1},0,0\rangle,$$

$$F_2\ |\overline{2},2,\overline{1}\rangle=\sqrt{2}\ |\overline{1},0,0\rangle\ ,\qquad F_2\ |\overline{1},0,0\rangle=\sqrt{2}\ |0,\overline{2},1\rangle,$$

$$F_3\ |0,\overline{2},1\rangle=\ |0,0,\overline{1}\rangle$$

七、G_2 李代数基本表示的方块权图

G_2 李代数的邓金图和嘉当矩阵如下:



$$A=\begin{pmatrix}2 & -1\\ -3 & 2\end{pmatrix}$$

根据嘉当矩阵可写出素根和基本主权的关系

$$\boldsymbol{r}_1 = 2\boldsymbol{w}_1 - 3\boldsymbol{w}_2 \ , \qquad \boldsymbol{r}_2 = -\boldsymbol{w}_1 + 2\boldsymbol{w}_2 \tag{7.177}$$

表示 $(0,1)$ 是七维表示, 包含两个主权 $(0,1)$ 和 $(0,0)$. 与最高权 $(0,1)$ 等价的权为

$$(0,1)\ , \qquad (1,\overline{1})\ , \qquad (\overline{1},2)\ , \qquad (1,\overline{2})\ , \qquad (\overline{1},1)\ , \qquad (0,\overline{1}) \tag{7.178}$$

主权 $(0,0)$ 只有一条路径, 因而也是单权. 降算符的非零矩阵元列举如下. 与前面一样, 在写降算符 F_μ 的非零矩阵元时, 省略状态基 $|\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}\rangle$ 中的 $\boldsymbol{M}$

$$\begin{aligned}
&F_2\ |0,1\rangle = \ |1,\overline{1}\rangle\ , \qquad &&F_1\ |1,\overline{1}\rangle = \ |\overline{1},2\rangle\ , \qquad &&F_2\ |\overline{1},2\rangle = \sqrt{2}\ |0,0\rangle, \\
&F_2\ |0,0\rangle = \sqrt{2}\ |1,\overline{2}\rangle\ , \qquad &&F_1\ |1,\overline{2}\rangle = \ |\overline{1},1\rangle\ , \qquad &&F_2\ |\overline{1},1\rangle = \ |0,\overline{1}\rangle
\end{aligned}$$

表示 $(1,0)$ 是伴随表示, 14 维. 它包含三个主权 $(1,0)$, $(0,1)$ 和 $(0,0)$. 主权 $(0,1)$ 只有一条路径, 因而是单权. 主权 $(0,0)$ 有两条路径, 而且根据方块权图的纺锤形要求, 它应该是二重权, 从矩阵元计算中也发现它必须是二重权. 设

$$F_1\ |2,\overline{3}\rangle = \sqrt{2}\ |(0,0)_1\rangle\ , \qquad F_2\ |\overline{1},2\rangle = a\ |(0,0)_1\rangle + b\ |(0,0)_2\rangle$$

则

$$E_1 F_2\ |\overline{1},2\rangle = a\sqrt{2}\ |2,\overline{3}\rangle = F_2 E_1\ |\overline{1},2\rangle = \sqrt{3}\ |2,\overline{3}\rangle$$

得

$$a = \sqrt{3/2}\ , \qquad b = \left(2 - a^2\right)^{1/2} = \sqrt{1/2}$$

可见 $b \neq 0$. 请注意这里算得的矩阵元素与 SU(3) 群伴随表示中的类似矩阵元素不同. 主权 $(1,0)$ 的外尔轨道长度等于 6, 等价权有

$$(1,0)\ , \qquad (\overline{1},3)\ , \qquad (2,\overline{3})\ , \qquad (\overline{2},3)\ , \qquad (1,\overline{3})\ , \qquad (\overline{1},0) \tag{7.179}$$

降算符的非零矩阵元列举如下

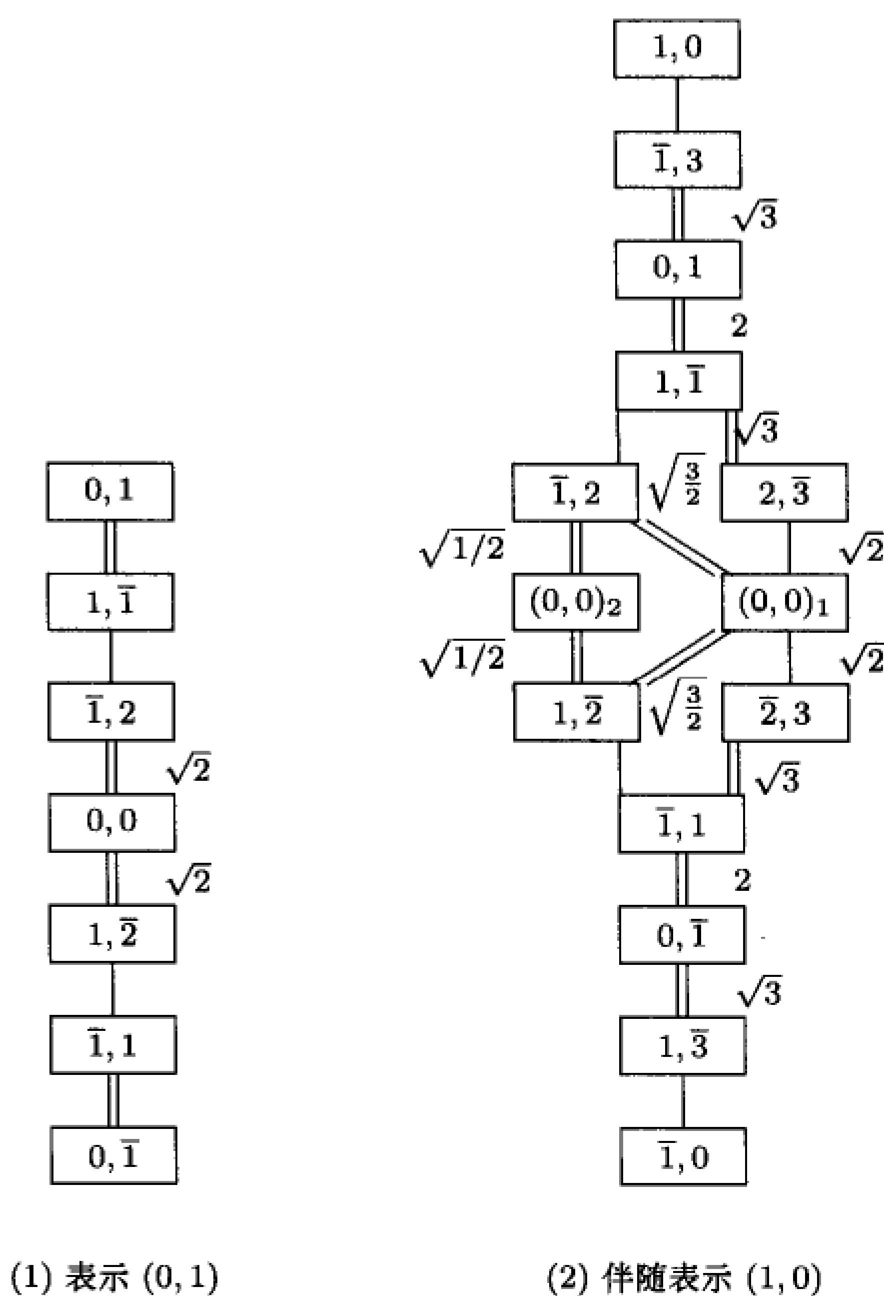
$$\begin{aligned}
&F_1\ |1,0\rangle = \ |\overline{1},3\rangle\ , \qquad &&F_2\ |\overline{1},3\rangle = \sqrt{3}\ |0,1\rangle, \\
&F_2\ |0,1\rangle = 2\ |1,\overline{1}\rangle\ , \qquad &&F_2\ |1,\overline{1}\rangle = \sqrt{3}\ |2,\overline{3}\rangle, \\
&F_1\ |1,\overline{1}\rangle = \ |\overline{1},2\rangle\ , \qquad &&F_1\ |2,\overline{3}\rangle = \sqrt{2}\ |(0,0)_1\rangle, \\
&F_2\ |\overline{1},2\rangle = \sqrt{3/2}\ |(0,0)_1\rangle + \sqrt{1/2}\ |(0,0)_2\rangle, \\
&F_2\ |(0,0)_1\rangle = \sqrt{3/2}\ |1,\overline{2}\rangle\ , \qquad &&F_2\ |(0,0)_2\rangle = \sqrt{1/2}\ |1,\overline{2}\rangle
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&F_1\ |(0,0)_1\rangle = \sqrt{2}\ |\overline{2},3\rangle\ , \quad && F_1\ |1,\overline{2}\rangle = \ |\overline{1},1\rangle, \\
&F_2\ |\overline{2},3\rangle = \sqrt{3}\ |\overline{1},1\rangle\ , && F_2\ |\overline{1},1\rangle = 2\ |0,\overline{1}\rangle, \\
&F_2\ |0,\overline{1}\rangle = \sqrt{3}\ |1,\overline{3}\rangle\ . && F_1\ |1,\overline{3}\rangle = \ |\overline{1},0\rangle
\end{aligned}
$$

注意, 在伴随表示中, 权矢量等于李代数的根矢量. 两个零权对应两个零根. 图中在零权上面的权对应正根, 零权下面的权对应负根

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{w}_1 = 2\boldsymbol{r}_1 + 3\boldsymbol{r}_2\ , \quad && -\boldsymbol{w}_1 + 3\boldsymbol{w}_2 = \boldsymbol{r}_1 + 3\boldsymbol{r}_2, \\
&\boldsymbol{w}_2 = \boldsymbol{r}_1 + 2\boldsymbol{r}_2\ , && \boldsymbol{w}_1 - \boldsymbol{w}_2 = \boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2, \\
&2\boldsymbol{w}_1 - 3\boldsymbol{w}_2 = \boldsymbol{r}_1\ , && -\boldsymbol{w}_1 + 2\boldsymbol{w}_2 = \boldsymbol{r}_2
\end{aligned}
\tag{7.180}
$$

两个基本表示的方块权图画在图 7.5.



(1) 表示 $(0,1)$　　　　(2) 伴随表示 $(1,0)$

图 7.5　G_2 李代数基本表示的方块权图

用方块权图方法原则上可以计算在任何单纯李代数的任何不可约表示 $\boldsymbol{M}$ 中包含哪些基本主权及其重数, 在表示空间中包含哪些状态基和生成元在这些状态基中的矩阵元. 当权的重数比较高时, 计算会变得相当复杂, 而且复杂程度会依赖于对重权的状态基的选择, 但是不会产生原则上的困难. 方块权图方法有两个基本的缺点：一是在一个不可约表示中权的分布不直观. 对 2 秩李代数, 这缺点可用平面权图方法克服. 二是状态基的物理背景和重权的产生原因不清楚. 我们知道, 在物理中状态基常与粒子波函数相联系的, 它们可能是同一能级简并的定态波函数, 也可能是具有某种对称性的不同粒子的状态等. 物理学中了解这些状态基的构造, 即波函数的具体形式是十分重要的事. 但方块权图除了告诉我们这些状态基对应的权和生成元对这些状态基的作用规律外, 没有对波函数形式提供信息. 在后面几章, 我们将对物理中常见的李群, 研究波函数的性质.

* 八、平面权图

对 2 秩李代数, 权只有两个分量, 可以把一个不可约表示所包含的权及其重数在一个平面直角坐标系中直观地画出来, 这就是平面权图. 对于根矢量和权矢量, 我们采用过两种表象. 一种是采用正交归一的矢量基, 在生成元取嘉当 - 外尔基时以这样的基表达根矢量和权矢量. 另一种是以基本主权 $\boldsymbol{w}_\mu$ 为基, 根矢量和权矢量的分量都是整数, 但矢量基 $\boldsymbol{w}_\mu$ 一般不是正交归一的, 如式 (7.143) 所示. 在用一个平面直角坐标系把权矢量表达出来时, 取第一种表象比较方便. 即使采用基本主权 $\boldsymbol{w}_\mu$ 为基, 也先要把基本主权在第一种表象中的分量算出来, 画在平面直角坐标系中, 然后以基本主权为基, 选用斜坐标系.

对 A_2 李代数 [SU(3) 群], 按照式 (7.69)、(7.72)、(7.75)、(7.83) 和 (7.84), SU(3) 群自身表示生成元取为 (请与附录 24 比较)

$$\begin{aligned}
&H_1 = \sqrt{2}T_3^{(3)} = \sqrt{2}T_8, \qquad &&H_2 = \sqrt{2}T_2^{(3)} = \sqrt{2}T_3, \\
&E_{\boldsymbol{\alpha}} = E_{-\boldsymbol{\alpha}}^{\dagger} = T_{12}^{(1)} + \mathrm{i}T_{12}^{(2)} = T_1 + \mathrm{i}T_2, \qquad &&E_{\boldsymbol{\beta}} = E_{-\boldsymbol{\beta}}^{\dagger} = T_{13}^{(1)} + \mathrm{i}T_{13}^{(2)} = T_4 + \mathrm{i}T_5, \\
&E_{\boldsymbol{\gamma}} = E_{-\boldsymbol{\gamma}}^{\dagger} = T_{23}^{(1)} + \mathrm{i}T_{23}^{(2)} = T_6 + \mathrm{i}T_7
\end{aligned} \tag{7.181}$$

写成矩阵形式

$$H_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}, \qquad H_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$E_{\alpha}=\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&0\\0&0&0\end{pmatrix},\qquad E_{\beta}=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&0&0\\0&0&0\end{pmatrix},\qquad E_{\gamma}=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&0&0\end{pmatrix}$$

直接计算得

$$\begin{aligned}
&[H_1,\ E_{\alpha}]=0, &&[H_2,\ E_{\alpha}]=\sqrt{2}\ E_{\alpha},\\
&[H_1,\ E_{\beta}]=\sqrt{3/2}E_{\beta}, &&[H_2,\ E_{\beta}]=\sqrt{1/2}\ E_{\beta},\\
&[H_1,\ E_{\gamma}]=\sqrt{3/2}E_{\gamma}, &&[H_2,\ E_{\gamma}]=-\sqrt{1/2}\ E_{\gamma}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{r}_1=\boldsymbol{\alpha}=\sqrt{2}\ \boldsymbol{e}_2,\\
&\boldsymbol{r}_2=\boldsymbol{\gamma}=\sqrt{3/2}\ \boldsymbol{e}_1-\sqrt{1/2}\ \boldsymbol{e}_2,\\
&\boldsymbol{\beta}=\sqrt{3/2}\ \boldsymbol{e}_1+\sqrt{1/2}\ \boldsymbol{e}_2=\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{r}_2
\end{aligned}\tag{7.182}$$

其中, $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\gamma}$ 是素根, $\boldsymbol{\beta}$ 是正根.

$$g_{jk}=-2\left(\alpha_j\alpha_k+\beta_j\beta_k+\gamma_j\gamma_k\right)=-6\ \delta_{jk}\tag{7.183}$$

A_2 李代数的嘉当矩阵 A 及其逆矩阵 A^{-1} 为

$$A=\begin{pmatrix}2&-1\\-1&2\end{pmatrix},\qquad A^{-1}=\frac{1}{3}\begin{pmatrix}2&1\\1&2\end{pmatrix}$$

两个基本主权是

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{w}_1=\frac{1}{3}\left(2\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{r}_2\right)=\sqrt{1/6}\ \boldsymbol{e}_1+\sqrt{1/2}\ \boldsymbol{e}_2,\\
&\boldsymbol{w}_2=\frac{1}{3}\left(\boldsymbol{r}_1+2\boldsymbol{r}_2\right)=\sqrt{2/3}\ \boldsymbol{e}_1
\end{aligned}\tag{7.184}$$

若干表示的平面权图见图 7.6. 按物理上的习惯, 对 SU(3) 群的平面权图, 取 $\boldsymbol{e}_1$ 沿纵轴方向, $\boldsymbol{e}_2$ 沿横轴方向.

对李代数 $B_2\approx C_2$ [群 SO(5)~USp(4)], 按照式 (7.93)、(7.95)~(7.97), SO(5) 群的自身表示生成元取为

$$\begin{aligned}
&H_1=T_{12}, &&H_2=T_{34},\\
&E_{\boldsymbol{r}_1}=\frac{1}{2}\left\{T_{23}-\mathrm{i}T_{13}-\mathrm{i}T_{24}-T_{14}\right\}, &&E_{\boldsymbol{\alpha}}=\frac{1}{2}\left\{T_{23}-\mathrm{i}T_{13}+\mathrm{i}T_{24}+T_{14}\right\},\\
&E_{\boldsymbol{\beta}}=\sqrt{\frac{1}{2}}\left\{T_{25}-\mathrm{i}T_{15}\right\}, &&E_{\boldsymbol{r}_2}=\sqrt{\frac{1}{2}}\left\{T_{45}-\mathrm{i}T_{35}\right\}
\end{aligned}$$

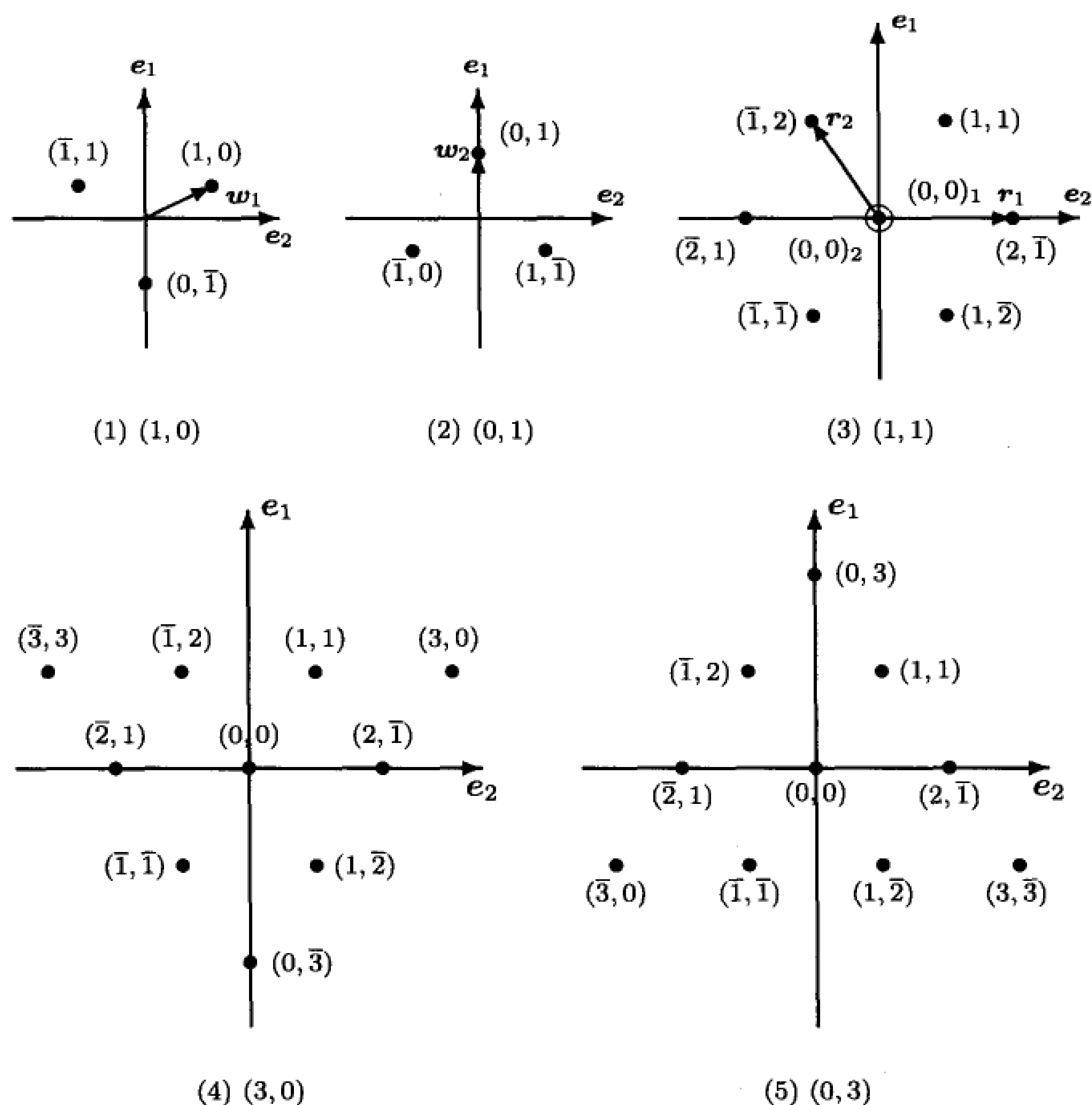


图 7.6 SU(3) 群若干表示的平面权图

对应负根的生成元为相应正根生成元的转置共轭. 由对易关系式 (7.94) 算得

$$
\begin{aligned}
&[H_1,\ E_{\mathbf{r}_1}] = E_{\mathbf{r}_1}, &&[H_2,\ E_{\mathbf{r}_1}] = -E_{\mathbf{r}_1},\\
&[H_1,\ E_{\boldsymbol{\alpha}}] = E_{\boldsymbol{\alpha}}, &&[H_2,\ E_{\boldsymbol{\alpha}}] = E_{\boldsymbol{\alpha}},\\
&[H_1,\ E_{\boldsymbol{\beta}}] = E_{\boldsymbol{\beta}}, &&[H_2,\ E_{\boldsymbol{\beta}}] = 0,\\
&[H_1,\ E_{\mathbf{r}_2}] = 0, &&[H_2,\ E_{\mathbf{r}_2}] = E_{\mathbf{r}_2}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{e}_2, &&\boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{e}_2,\\
&\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 = \boldsymbol{r}_1 + 2\boldsymbol{r}_2, &&\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2
\end{aligned}
\tag{7.185}
$$

其中, $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 是素根, $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 是正根.

$$g_{jk} = -2\left\{(\boldsymbol{r}_1)_j(\boldsymbol{r}_1)_k + (\boldsymbol{r}_2)_j(\boldsymbol{r}_2)_k + \alpha_j\alpha_k + \beta_j\beta_k\right\} = -6\ \delta_{jk} \tag{7.186}$$

B_2 李代数的嘉当矩阵 A 及其逆矩阵 A^{-1} 为

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -2 & 2 \end{pmatrix}, \qquad A^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{7.187}$$

两个基本主权是

$$\boldsymbol{w}_1 = \boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{e}_1, \qquad \boldsymbol{w}_2 = \frac{1}{2}\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2) \tag{7.188}$$

SO(5) 群基本表示 (1,0), (0,1) 和伴随表示 (0,2) 的平面权图见图 7.7.

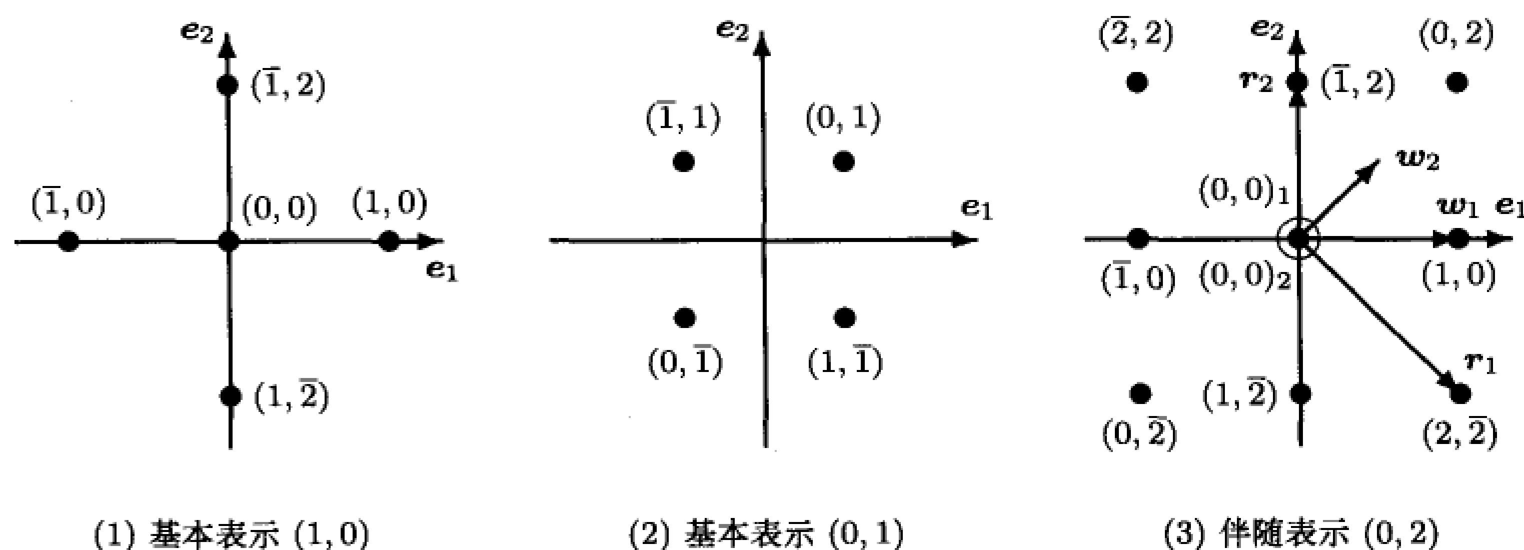


图 7.7　SO(5) 群若干表示的平面权图

G_2 李代数的嘉当矩阵 A 及其逆矩阵 A^{-1} 为

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -3 & 2 \end{pmatrix}, \qquad A^{-1} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 2 \end{pmatrix} \tag{7.189}$$

素根中, $\boldsymbol{r}_1$ 是长根, $\boldsymbol{r}_2$ 是短根. 根据式 (7.180), 选定素根的适当取向, 得 G_2 李代数的全部正根为

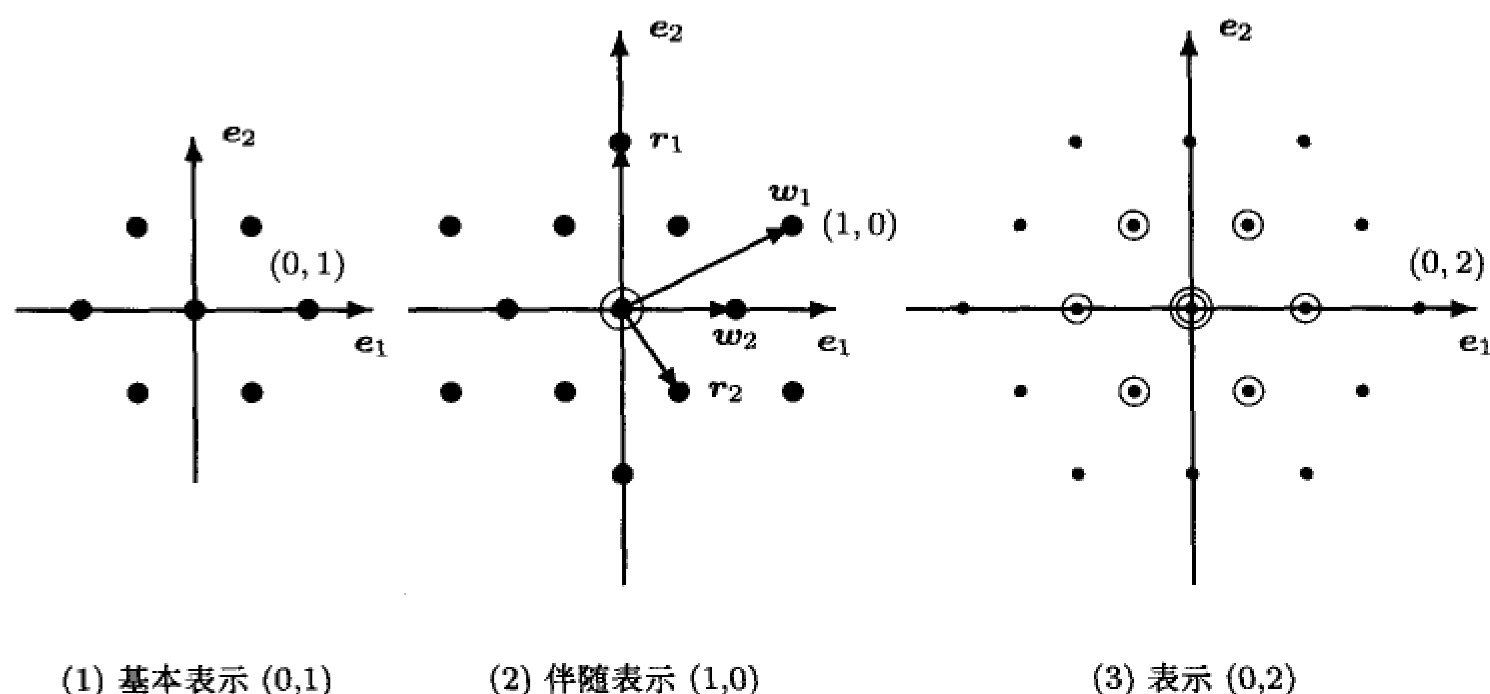
$$\begin{aligned}
\boldsymbol{r}_1 &= \sqrt{2}\ \boldsymbol{e}_2, \\
\boldsymbol{r}_2 &= \sqrt{1/6}\ \boldsymbol{e}_1 - \sqrt{1/2}\ \boldsymbol{e}_2, \\
\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2 &= \sqrt{1/6}\ \boldsymbol{e}_1 + \sqrt{1/2}\ \boldsymbol{e}_2, \\
\boldsymbol{r}_1 + 2\boldsymbol{r}_2 &= \sqrt{2/3}\ \boldsymbol{e}_1, \\
\boldsymbol{r}_1 + 3\boldsymbol{r}_2 &= \sqrt{3/2}\ \boldsymbol{e}_1 - \sqrt{1/2}\ \boldsymbol{e}_2, \\
2\boldsymbol{r}_1 + 3\boldsymbol{r}_2 &= \sqrt{3/2}\ \boldsymbol{e}_1 + \sqrt{1/2}\ \boldsymbol{e}_2
\end{aligned} \tag{7.190}$$

由此算出基林型和基本主权为

$$g_{jk} = -\sum_{\alpha\in\Delta} \alpha_j\alpha_k = -8\ \delta_{jk} \tag{7.191}$$

$$\boldsymbol{w}_1 = 2\boldsymbol{r}_1 + 3\boldsymbol{r}_2 = \sqrt{3/2}\ \boldsymbol{e}_1 + \sqrt{1/2}\ \boldsymbol{e}_2, \qquad \boldsymbol{w}_2 = \boldsymbol{r}_1 + 2\boldsymbol{r}_2 = \sqrt{2/3}\ \boldsymbol{e}_1 \tag{7.192}$$

G_2 李代数的若干表示的平面权图见图 7.8.



(1) 基本表示 (0,1)　　(2) 伴随表示 (1,0)　　(3) 表示 (0,2)

图 7.8 G_2 李代数若干表示的平面权图

7.7 克莱布施 - 戈登系数

两个不可约表示的直乘一般是可约表示，它可分解为若干个不可约表示的直和. 这直和称为克莱布施 - 戈登级数，而约化这可约表示的相似变换矩阵元素称为克莱布施 - 戈登系数. 本节将引入主权图的方法来计算单纯李代数直乘表示的克莱布施 - 戈登级数和克莱布施 - 戈登系数.

一、定义和基本方法

在单纯李代数的紧致实形里，不可约表示取幺正表示，两不可约表示的直乘 $\Delta = D^{\boldsymbol{M}^{(1)}} \times D^{\boldsymbol{M}^{(2)}}$ 还是幺正表示，可取幺正的相似变换 $C^{\boldsymbol{M}^{(1)}\boldsymbol{M}^{(2)}}$ 把它约化

$$\left(C^{\boldsymbol{M}^{(1)}\boldsymbol{M}^{(2)}}\right)^{-1}\left(D^{\boldsymbol{M}^{(1)}} \times D^{\boldsymbol{M}^{(2)}}\right)C^{\boldsymbol{M}^{(1)}\boldsymbol{M}^{(2)}} = \bigoplus_{\boldsymbol{M}} a_{\boldsymbol{M}} D^{\boldsymbol{M}} \tag{7.193}$$

$a_{\boldsymbol{M}}$ 是表示 $\boldsymbol{M}$ 在直乘表示约化中的重数. $C^{\boldsymbol{M}^{(1)}\boldsymbol{M}^{(2)}}$ 是 $d(\boldsymbol{M}^{(1)})d(\boldsymbol{M}^{(2)})$ 维矩阵，行指标为 $\boldsymbol{m}^{(1)}\boldsymbol{m}^{(2)}$，列指标为 $\boldsymbol{M},(r),\boldsymbol{m}$. r 用来区分约化中的重表示. $d(\boldsymbol{M}^{(i)})$ 是

表示 $\boldsymbol{M}^{(i)}$ 的维数, $i=1,2$. 直乘表示空间的状态基是参加乘积的两表示空间的状态基的直乘. 每个子空间的状态基在生成元作用下满足

$$\begin{aligned}
H_\mu\,|\boldsymbol{M}^{(i)},\ \boldsymbol{m}^{(i)}\rangle &= m_\mu^{(i)}\ |\boldsymbol{M}^{(i)},\ \boldsymbol{m}^{(i)}\rangle,\\
E_\mu\,|\boldsymbol{M}^{(i)},\ \boldsymbol{m}^{(i)}\rangle &= \sum\ |\boldsymbol{M}^{(i)},\ \boldsymbol{m}^{(i)}+\boldsymbol{r}_\mu\rangle\ D^{\boldsymbol{M}^{(i)}}_{(\boldsymbol{m}^{(i)}+\boldsymbol{r}_\mu)\boldsymbol{m}^{(i)}}(E_\mu),\\
F_\mu\,|\boldsymbol{M}^{(i)},\ \boldsymbol{m}^{(i)}\rangle &= \sum\ |\boldsymbol{M}^{(i)},\ \boldsymbol{m}^{(i)}-\boldsymbol{r}_\mu\rangle\ D^{\boldsymbol{M}^{(i)}}_{(\boldsymbol{m}^{(i)}-\boldsymbol{r}_\mu)\boldsymbol{m}^{(i)}}(F_\mu)
\end{aligned}$$

式中对重权态求和. 通常把标记表示的符号 $\boldsymbol{M}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{M}^{(2)}$ 省略

$$|\boldsymbol{M}^{(1)},\boldsymbol{m}^{(1)}\rangle|\boldsymbol{M}^{(2)},\boldsymbol{m}^{(2)}\rangle = |\boldsymbol{m}^{(1)}\rangle|\boldsymbol{m}^{(2)}\rangle \tag{7.194}$$

约化后的状态基表为

$$||\boldsymbol{M},(r),\boldsymbol{m}\rangle = \sum_{\boldsymbol{m}^{(1)},\boldsymbol{m}^{(2)}} |\boldsymbol{m}^{(1)}\rangle|\boldsymbol{m}^{(2)}\rangle\ C^{\boldsymbol{M}^{(1)}\boldsymbol{M}^{(2)}}_{\boldsymbol{m}^{(1)},\boldsymbol{m}^{(2)},\boldsymbol{M},(r),\boldsymbol{m}} \tag{7.195}$$

式 (7.195) 是表达和计算单纯李代数两不可约表示直乘分解的克莱布施－戈登系数的最常用的方法. 生成元 I_A 可取谢瓦莱基 H_μ, E_μ 和 F_μ, 它们对状态基的作用如下式所示

$$I_A||\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}\rangle = \sum_{\boldsymbol{m}^{(1)},\boldsymbol{m}^{(2)}} \left\{\left(I_A|\boldsymbol{m}^{(1)}\rangle\right)|\boldsymbol{m}^{(2)}\rangle + |\boldsymbol{m}^{(1)}\rangle\left(I_A|\boldsymbol{m}^{(2)}\rangle\right)\right\} C^{\boldsymbol{M}^{(1)}\boldsymbol{M}^{(2)}}_{\boldsymbol{m}^{(1)},\boldsymbol{m}^{(2)},\boldsymbol{M},(r),\boldsymbol{m}} \tag{7.196}$$

当 I_A 取 H_μ 时, 由式 (7.196) 得

$$\begin{aligned}
&\left(\boldsymbol{m}^{(1)}+\boldsymbol{m}^{(2)}\right) C^{\boldsymbol{M}^{(1)}\boldsymbol{M}^{(2)}}_{\boldsymbol{m}^{(1)},\boldsymbol{m}^{(2)},\boldsymbol{M},(r),\boldsymbol{m}} = C^{\boldsymbol{M}^{(1)}\boldsymbol{M}^{(2)}}_{\boldsymbol{m}^{(1)},\boldsymbol{m}^{(2)},\boldsymbol{M},(r),\boldsymbol{m}}\boldsymbol{m}\\
&C^{\boldsymbol{M}^{(1)}\boldsymbol{M}^{(2)}}_{\boldsymbol{m}^{(1)},\boldsymbol{m}^{(2)},\boldsymbol{M},(r),\boldsymbol{m}} = 0, \qquad \text{当}\ \ \boldsymbol{m}\neq\boldsymbol{m}^{(1)}+\boldsymbol{m}^{(2)}
\end{aligned} \tag{7.197}$$

即组合前后权矢量相加, $\boldsymbol{m}=\boldsymbol{m}^{(1)}+\boldsymbol{m}^{(2)}$. 这是式 (4.137) 的推广, 不同在于, 现在可能有重权, 当 $C^{\boldsymbol{M}^{(1)}\boldsymbol{M}^{(2)}}_{\boldsymbol{m}^{(1)},\boldsymbol{m}^{(2)},\boldsymbol{M},(r),\boldsymbol{m}}$ 的行 (或列) 指标确定后, 不为零的矩阵元素可能不止一个.

当 I_A 取 E_μ 或 F_μ 时, 由式 (7.196) 得

$$\begin{aligned}
&\sum_{\boldsymbol{m}^{(1)\prime}=\boldsymbol{m}^{(1)}\mp\boldsymbol{r}_j} D^{\boldsymbol{M}^{(1)}}(I_A)_{\boldsymbol{m}^{(1)}\boldsymbol{m}^{(1)\prime}} C^{\boldsymbol{M}^{(1)}\boldsymbol{M}^{(2)}}_{\boldsymbol{m}^{(1)\prime},\boldsymbol{m}^{(2)},\boldsymbol{M},(r),\boldsymbol{m}}\\
&\quad+\sum_{\boldsymbol{m}^{(2)\prime}=\boldsymbol{m}^{(2)}\mp\boldsymbol{r}_j} D^{\boldsymbol{M}^{(2)}}(I_A)_{\boldsymbol{m}^{(2)}\boldsymbol{m}^{(2)\prime}} C^{\boldsymbol{M}^{(1)}\boldsymbol{M}^{(2)}}_{\boldsymbol{m}^{(1)},\boldsymbol{m}^{(2)\prime},\boldsymbol{M},(r),\boldsymbol{m}}\\
&=\sum_{\boldsymbol{m}'=\boldsymbol{m}\pm\boldsymbol{r}_j} C^{\boldsymbol{M}^{(1)}\boldsymbol{M}^{(2)}}_{\boldsymbol{m}^{(1)},\boldsymbol{m}^{(2)},\boldsymbol{M},(r),\boldsymbol{m}'}\ D^{\boldsymbol{M}}(I_A)_{\boldsymbol{m}'\boldsymbol{m}}
\end{aligned} \tag{7.198}$$

其中, 正负号中上面符号对应 E_μ, 下面符号对应 F_μ.

二、克莱布施-戈登级数中表示的特性

设 $\boldsymbol{M}$ 出现在单纯李代数两不可约表示直乘分解的克莱布施 - 戈登级数中, 它的最高权态展开式为

$$||\boldsymbol{M},(r),\boldsymbol{M}\rangle=\sum_{\boldsymbol{m}^{(1)}}|\boldsymbol{m}^{(1)}\rangle|\boldsymbol{M}-\boldsymbol{m}^{(1)}\rangle\ C_{\boldsymbol{m}^{(1)}}^{(r)} \tag{7.199}$$

这里为了简单起见, 简化了克莱布施 - 戈登系数的符号. 最高权态在升算符 E_μ 作用下得零. 如果 $\boldsymbol{m}^{(1)}$ 不是表示 $\boldsymbol{M}^{(1)}$ 中的最高权, 则态 $|\boldsymbol{m}^{(1)}\rangle$ 必在某升算符 E_μ 作用下不为零, 设

$$E_\mu\ |\boldsymbol{m}^{(1)}\rangle=a\ |\boldsymbol{m}^{(1)}+\boldsymbol{r}_\mu\rangle+\cdots$$

省略的是重权的态. 为了保持式 (7.199) 在 E_μ 作用下得零, 式 (7.199) 的求和式中必须包含另一项 $|\boldsymbol{m}^{(1)}+\boldsymbol{r}_\mu\rangle|\boldsymbol{M}-\boldsymbol{m}^{(1)}-\boldsymbol{r}_\mu\rangle\ C_{\boldsymbol{m}^{(1)}+\boldsymbol{r}_\mu}^{(r)}$, 其中

$$E_\mu\ |\boldsymbol{M}-\boldsymbol{m}^{(1)}-\boldsymbol{r}_\mu\rangle=b\ |\boldsymbol{M}-\boldsymbol{m}^{(1)}\rangle$$

且满足

$$a\ C_{\boldsymbol{m}^{(1)}}^{(r)}+b\ C_{\boldsymbol{m}^{(1)}+\boldsymbol{r}_\mu}^{(r)}=0$$

这过程要一直继续下去, 直到 $\boldsymbol{m}^{(1)}$ 变成表示 $\boldsymbol{M}^{(1)}$ 的最高权 $\boldsymbol{M}^{(1)}$. 这就是说, 在式 (7.199) 的展开式中一定包含 $\boldsymbol{m}^{(1)}=\boldsymbol{M}^{(1)}$ 的项, 此时 $\boldsymbol{M}-\boldsymbol{m}^{(1)}=\boldsymbol{M}-\boldsymbol{M}^{(1)}$, 它必须是表示 $\boldsymbol{M}^{(2)}$ 中的一个权 $\boldsymbol{m}^{(2)}$. 同理在式 (7.199) 的展开式中也一定包含 $\boldsymbol{m}^{(2)}=\boldsymbol{M}^{(2)}$ 的项. 于是有

$$\boldsymbol{M}=\boldsymbol{M}^{(1)}+\boldsymbol{m}^{(2)}=\boldsymbol{m}^{(1)}+\boldsymbol{M}^{(2)} \tag{7.200}$$

式 (7.200) 是在克莱布施 - 戈登级数中出现的表示最高权 $\boldsymbol{M}$ 要满足的必要条件.

在两表示 $\boldsymbol{M}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{M}^{(2)}$ 的直乘空间中, 最高权的状态是

$$|\boldsymbol{M}^{(1)}\rangle|\boldsymbol{M}^{(2)}\rangle \tag{7.201}$$

它是单权. 因此, 在克莱布施 - 戈登级数中一定出现一个重数为 1 的表示 $\boldsymbol{M}_1$, 它等于乘积表示最高权之和

$$\boldsymbol{M}_1=\boldsymbol{M}^{(1)}+\boldsymbol{M}^{(2)} \tag{7.202}$$

在克莱布施 - 戈登级数中出现的其他表示 $\boldsymbol{M}$ 满足

$$\boldsymbol{M}_1-\boldsymbol{M}=\sum_\mu c_\mu\ \boldsymbol{r}_\mu\ ,\qquad c=\sum_\mu c_\mu \tag{7.203}$$

c 称为表示 $\boldsymbol{M}$ 在克莱布施 - 戈登级数中的序号. 规定在克莱布施 - 戈登级数中的表示按序号自小至大排起来, 序号相同的表示排列次序任意.

三、主权图方法

研究单纯李代数两不可约表示直乘分解主要包括三个互相关联的内容. 一是确定克莱布施 - 戈登级数, 要研究级数中出现哪些表示和它们的重数. 二是计算这些表示最高权态的展开式. 当这表示的重数为 1 时, 最高权态允许自由选择一个相因子, 通常选择最高权态展开式中 $\boldsymbol{m}^{(1)}=\boldsymbol{M}^{(1)}$ 的项 (至少是其中的一项) 系数为正实数. 当这表示的重数大于 1 时, 最高权态还允许做适当的线性组合. 实际计算发现, 一般都可以通过选择适当的相因子或适当的线性组合使克莱布施 - 戈登系数都是实数. 若 $\boldsymbol{M}^{(1)}=\boldsymbol{M}^{(2)}$, 当约化后的表示 $\boldsymbol{M}$ 重数为 1 时, 克莱布施 - 戈登系数对 $|\boldsymbol{m}^{(1)}\rangle$ 和 $|\boldsymbol{m}^{(2)}\rangle$ 交换有确定的对称性, 当重数大于 1 时, 可以选择状态基的适当组合, 使克莱布施 - 戈登系数对 $|\boldsymbol{m}^{(1)}\rangle$ 和 $|\boldsymbol{m}^{(2)}\rangle$ 交换有确定的对称性. 通常把这样的表示称为对称表示或反对称表示. 三是由最高权态的展开式出发用降算符作用, 计算其他权态的展开式. 这些问题可以通过主权图方法得到解决.

首先, 在 $\boldsymbol{M}^{(2)}$ 表示空间中寻找所有满足下面条件的 $\boldsymbol{m}^{(2)}$, 它与 $\boldsymbol{M}^{(1)}$ 相加会得到主权 $\boldsymbol{M}$, 这些 $\boldsymbol{M}$ 就是有可能在克莱布施 - 戈登级数中出现的表示的最高权. 把它们按序号 c 自小至大排列起来, 补以重数 $a_{\boldsymbol{M}}$. 计算克莱布施 - 戈登级数就是要计算这些重数 $a_{\boldsymbol{M}}$. 这些重数是非负整数, 但可以为零.

其次, 从序号为零的表示 $\boldsymbol{M}_1$ 开始, 它的重数 $a_{\boldsymbol{M}_1}$ 是 1, 最高权态为

$$||\boldsymbol{M}_1,\boldsymbol{M}_1\rangle=|\boldsymbol{M}^{(1)}\rangle|\boldsymbol{M}^{(2)}\rangle,\qquad \boldsymbol{M}_1=\boldsymbol{M}^{(1)}+\boldsymbol{M}^{(2)} \tag{7.204}$$

计算这表示的方块权图, 确定这表示中包含的各主权 $\boldsymbol{M}$ 的重数. 如果需要计算克莱布施 - 戈登系数, 则可通过降算符作用计算这表示其他状态的展开式. 各主权 $\boldsymbol{M}$ 的重数也可在有关书中 (如文献 [13]) 查到.

然后对序号为 1 的权 $\boldsymbol{M}_2$, 计算它在直乘空间的重数和在表示 $\boldsymbol{M}_1$ 表示空间的重数之差, 其差数就是表示 $\boldsymbol{M}_2$ 在克莱布施 - 戈登级数中的重数 $a_{\boldsymbol{M}_2}$. 依此类推, 表示 $\boldsymbol{M}$ 在克莱布施 - 戈登级数中的重数 $a_{\boldsymbol{M}}$, 等于在直乘空间中它的重数, 减去已经出现在克莱布施 - 戈登级数中的各表示的表示空间中它的重数之和. 把各主权在直乘空间和在约化后各表示空间中的重数排列成表, 称为直乘表示约化的主权图, 由它可以方便地计算直乘表示约化的克莱布施 - 戈登级数.

主权图包括如下内容: 从纵向看, 从 $\boldsymbol{M}_1$ 开始, 在克莱布施 - 戈登级数中出现的每一个表示 $\boldsymbol{M}$ 占据一列, 列出该表示包含的各主权及其重数, 重数为 1 省略. 最左面一列列出表示乘积空间各主权的重数及其外尔轨道长度 ($O.S.$). 它们的乘积之和就是乘积空间的维数 $d(\boldsymbol{M}^{(1)})d(\boldsymbol{M}^{(2)})$. 对每一个表示 $\boldsymbol{M}$, 各主权的重数与外尔轨道长度乘积之和就是该表示的维数. 把这些维数都列在主权图中, 可检查计算得的克莱布施 - 戈登级数的正确性.

第三, 对在克莱布施 - 戈登级数中出现的表示, 它的最高权态有两种计算方法.

一是根据式 (7.123), 要求所有升算符 E_μ 作用得零, 然后归一化. 另一是根据属不等价不可约表示状态基正交的条件, 要求它与所有已经出现在克莱布施 - 戈登级数中的各表示的相同权的状态基正交. 有了最高权态的展开式, 就可通过降算符作用计算这表示其他状态的展开式.

最后, 因为前面的计算错误会直接影响后面的计算, 所以计算过程中每一计算结果都要做检验. 对每一个状态基的展开式 (7.195), 应该检查等式各项权之和是否相同, 检查此展开式是否归一, 与已得到的相同权的展开式是否正交, 当 $\boldsymbol{M}^{(1)} = \boldsymbol{M}^{(2)}$ 时, 检查此展开式是否满足需要的对称性, 检查对称展开式的总数是否等于 $d(\boldsymbol{M}^{(1)})[d(\boldsymbol{M}^{(1)})+1]/2$, 反对称展开式的总数是否等于 $d(\boldsymbol{M}^{(1)})[d(\boldsymbol{M}^{(1)})-1]/2$.

第四章中我们研究过 SU(2) 群克莱布施 - 戈登系数的对称性质 (4.143). 这些对称性质有一定的普遍意义, 但由于单纯李代数的表示中存在重权, 使公式变得比较复杂. 附录 30 做了一些简单介绍.

四、SU(3) 群表示的直乘分解

从本小节开始, 我们通过例子来说明克莱布施 - 戈登级数和系数的计算方法. SU(3) 群 (A_2 李代数) 的若干表示的方块权图已列于图 7.3. 先算两个基本表示的直乘分解: $(1,0)\times(0,1)$.

由图 7.3 可知, 在直乘表示空间只有两个主权, $(1,1)$ 和 $(0,0)$. 主权 $(1,1)$ 的外尔轨道长度是 6, 它是直乘表示空间的最高权, 因而表示 $(1,1)$ 一定出现在克莱布施 - 戈登级数中, 且重数为 1. 主权为 $(0,0)$ 的外尔轨道长度是 1, 它在直乘表示空间的状态基有三个

$$|(1,0),(1,0)\rangle|(0,1),(\bar{1},0)\rangle, \quad |(1,0),(\bar{1},1)\rangle|(0,1),(1,\bar{1})\rangle, \quad |(1,0),(0,\bar{1})\rangle|(0,1),(0,1)\rangle$$

因为在表示 $(1,1)$ 中主权 $(0,0)$ 是二重权, 所以在克莱布施 - 戈登级数中表示 $(0,0)$ 的重数是 $3-2=1$. 这样, 计算得 SU(3) 群两个基本表示直乘分解的主权图如图 7.9. 方框里的填数是主权, 方框右上角的数字是该主权的重数, 重数为 1 时省略. 最下面一行是表示直乘分解的克莱布施 - 戈登级数.

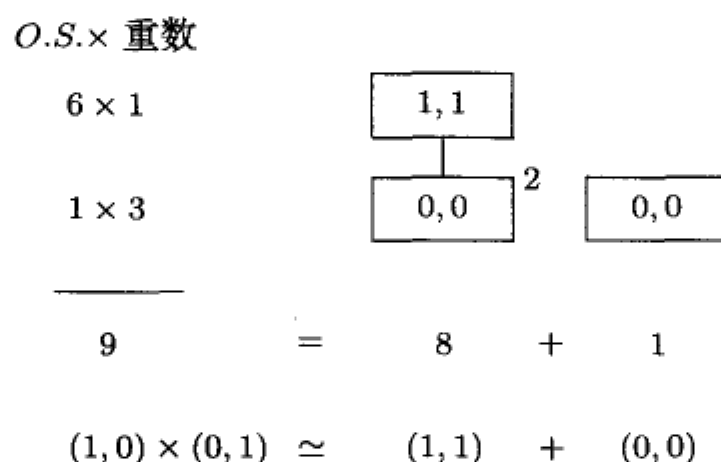


图 7.9 SU(3) 群直乘表示 $(1,0)\times(0,1)$ 分解的主权图

表示 $(1,1)$ 的最高权态展开式为

$$||(1,1),(1,1)\rangle = |(1,0),(1,0)\rangle|(0,1),(0,1)\rangle$$

可由方块权图 (见图 7.3) 计算其他状态的展开式

$$\begin{aligned}
&||(1,1),(\bar{1},2)\rangle = F_1\ ||(1,1),(1,1)\rangle = |(1,0),(\bar{1},1)\rangle|(0,1),(0,1)\rangle,\\
&||(1,1),(2,\bar{1})\rangle = F_2\ ||(1,1),(1,1)\rangle = |(1,0),(1,0)\rangle|(0,1),(1,\bar{1})\rangle,\\
&||(1,1),(0,0)_1\rangle = \sqrt{1/2}F_1\ ||(1,1),(2,\bar{1})\rangle\\
&\quad = \sqrt{1/2}\left\{|(1,0),(1,0)\rangle|(0,1),(\bar{1},0)\rangle + |(1,0),(\bar{1},1)\rangle|(0,1),(1,\bar{1})\rangle\right\},\\
&||(1,1),(0,0)_2\rangle = \sqrt{2/3}\left\{F_2||(1,1),(\bar{1},2)\rangle - \sqrt{1/2}||(1,1),(0,0)_1\rangle\right\}\\
&\quad = \sqrt{2/3}\left\{|(1,0),(\bar{1},1)\rangle|(0,1),(1,\bar{1})\rangle + |(1,0),(0,\bar{1})\rangle|(0,1),(0,1)\rangle\right\}\\
&\qquad -\sqrt{1/6}\ \left\{|(1,0),(1,0)\rangle|(0,1),(\bar{1},0)\rangle + |(1,0),(\bar{1},1)\rangle|(0,1),(1,\bar{1})\rangle\right\}\\
&\quad = \sqrt{1/6}\left\{-|(1,0),(1,0)\rangle|(0,1),(\bar{1},0)\rangle + |(1,0),(\bar{1},1)\rangle|(0,1),(1,\bar{1})\rangle\right.\\
&\qquad \left.+2\ |(1,0),(0,\bar{1})\rangle|(0,1),(0,1)\rangle\right\},\\
&||(1,1),(\bar{2},1)\rangle = \sqrt{1/2}F_1\ ||(1,1),(0,0)_1\rangle = |(1,0),(\bar{1},1)\rangle|(0,1),(\bar{1},0)\rangle,\\
&||(1,1),(1,\bar{2})\rangle = \sqrt{2}\ F_2\ ||(1,1),(0,0)_1\rangle = |(1,0),(0,\bar{1})\rangle|(0,1),(1,\bar{1})\rangle,\\
&||(1,1),(\bar{1},\bar{1})\rangle = F_1\ ||(1,1),(1,\bar{2})\rangle = |(1,0),(0,\bar{1})\rangle|(0,1),(\bar{1},0)\rangle
\end{aligned}$$

表示 $(0,0)$ 是一维表示, 状态展开式可根据条件 (7.123) 计算

$$\begin{aligned}
||(0,0),(0,0)\rangle \ &= \ c_1|(1,0),(1,0)\rangle|(0,1),(\bar{1},0)\rangle + c_2|(1,0),(\bar{1},1)\rangle|(0,1),(1,\bar{1})\rangle\\
&\quad +c_3|(1,0),(0,\bar{1})\rangle|(0,1),(0,1)\rangle
\end{aligned}$$

要求在升算符作用下得零, 有

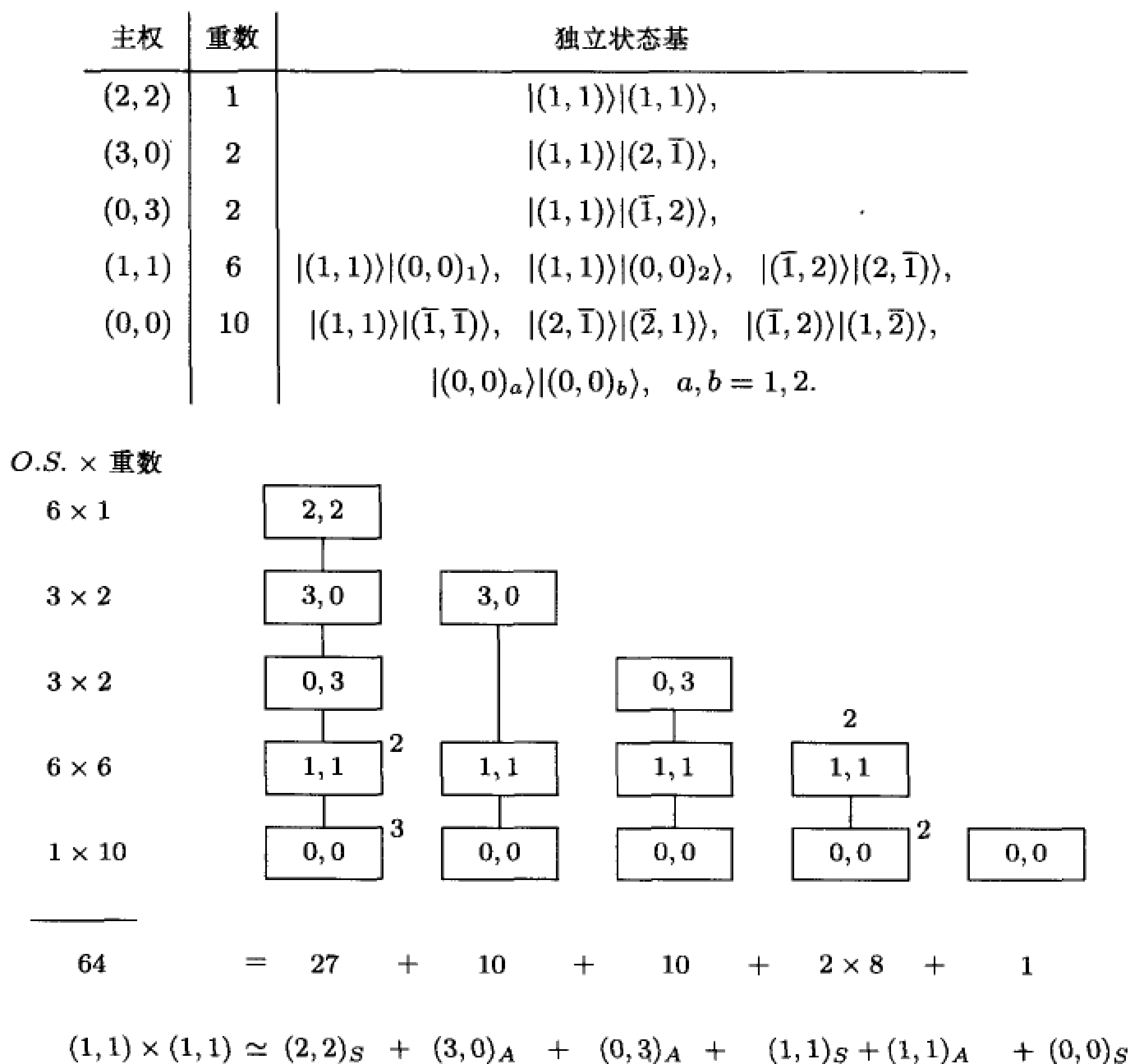
$$\begin{aligned}
&E_1||(0,0),(0,0)\rangle = c_1|(1,0),(1,0)\rangle|(0,1),(1,\bar{1})\rangle + c_2|(1,0),(1,0)\rangle|(0,1),(1,\bar{1})\rangle = 0,\\
&E_2||(0,0),(0,0)\rangle = c_2|(1,0),(\bar{1},1)\rangle|(0,1),(0,1)\rangle + c_3|(1,0),(\bar{1},1)\rangle|(0,1),(0,1)\rangle = 0
\end{aligned}$$

解得 $c_1 = -c_2 = c_3 = \sqrt{1/3}$. 注意, 三个权为 $(0,0)$ 的状态基都互相正交.

再算两个伴随表示 $(1,1)$ 的直乘分解. 这是物理学中常用的一个公式. 按照图 7.3, 在直乘表示空间出现的主权有 $(2,2)$, $(3,0)$, $(0,3)$, $(1,1)$ 和 $(0,0)$, 它们的重数分别是 1, 2, 2, 6 和 10, 外尔轨道长度分别是 6, 3, 3, 6 和 1. 因为参加直乘的两个表示是相同的, 下面列举主权对应的独立状态基时, 省略因 $|\boldsymbol{m}^{(1)}\rangle$ 和 $|\boldsymbol{m}^{(2)}\rangle$ 交换得到的状态基.

在这些主权中, 除了 $(2,2)$ 外, 以其他主权作为最高权的不可约表示, 它们的方块权图都已列出在图 7.3, 它们分别包含哪些主权及其重数都已经清楚. 表示 $(2,2)$

的方块权图的计算见附录 31, 由计算结果知表示 $(2,2)$ 包含各主权 $(2,2)$, $(3,0)$, $(0,3)$, $(1,1)$ 和 $(0,0)$ 的重数分别是 1, 1, 1, 2 和 3. 由图 7.3 知, 表示 $(3,0)$ 包含各主权 $(3,0)$, $(1,1)$ 和 $(0,0)$ 的重数都是 1, 表示 $(0,3)$ 包含各主权 $(0,3)$, $(1,1)$ 和 $(0,0)$ 的重数都是 1, 表示 $(1,1)$ 包含主权 $(1,1)$ 和 $(0,0)$ 的重数是 1 和 2, 表示 $(0,0)$ 只包含一个单主权 $(0,0)$. 这样, 计算得 SU(3) 群两个伴随表示直乘分解的主权图如图 7.10. 最下面一行是表示直乘分解的克莱布施 - 戈登级数, 下标 S 和 A 描写该表示的状态展开式关于乘积状态交换的对称性.



主权	重数	独立状态基
$(2,2)$	1	$\|(1,1)\rangle\|(1,1)\rangle$,
$(3,0)$	2	$\|(1,1)\rangle\|(2,\overline{1})\rangle$,
$(0,3)$	2	$\|(1,1)\rangle\|(\overline{1},2)\rangle$,
$(1,1)$	6	$\|(1,1)\rangle\|(0,0)_1\rangle$, $\|(1,1)\rangle\|(0,0)_2\rangle$, $\|(\overline{1},2)\rangle\|(2,\overline{1})\rangle$,
$(0,0)$	10	$\|(1,1)\rangle\|(\overline{1},\overline{1})\rangle$, $\|(2,\overline{1})\rangle\|(\overline{2},1)\rangle$, $\|(\overline{1},2)\rangle\|(1,\overline{2})\rangle$,
		$\|(0,0)_a\rangle\|(0,0)_b\rangle$, $a,b=1,2$.

图 7.10 SU(3) 群直乘表示 $(1,1)\times(1,1)$ 分解的主权图

下面计算各表示的最高权态展开式. 由式 (7.204) 得表示 $(2,2)$ 最高权态为

$$||(2,2),(2,2)\rangle = |(1,1)\rangle|(1,1)\rangle$$

表示 $(2,2)$ 的状态展开式对两乘积状态交换是对称的. 其他表示最高权态的展开式

可用条件式 (7.123) 来计算. 设表示 (3, 0) 和 (0, 3) 的状态展开式为

$$
\begin{aligned}
\|(3,0),(3,0)\rangle &= a_1 \; |1,1\rangle \; |2,\overline{1}\rangle + a_2 \; |2,\overline{1}\rangle \; |1,1\rangle, \\
\|(0,3),(0,3)\rangle &= b_1 \; |1,1\rangle \; |\overline{1},2\rangle + b_1 \; |\overline{1},2\rangle \; |1,1\rangle
\end{aligned}
$$

用升算符作用得

$$
\begin{aligned}
E_2 \; \|(3,0),(3,0)\rangle &= a_1 \; |1,1\rangle|1,1\rangle + a_2 \; |1,1\rangle \; |1,1\rangle = 0, \\
E_1 \; \|(0,3),(0,3)\rangle &= b_1 \; |1,1\rangle \; |1,1\rangle + b_1 \; |1,1\rangle \; |1,1\rangle = 0
\end{aligned}
$$

解得 $a_1 = -a_2 = b_1 = -b_2 = \sqrt{1/2}$. 表示 (3, 0) 和表示 (0, 3) 的状态展开式都对两乘积状态交换是反对称的.

表示 $(1,1)$ 在克莱布施 – 戈登级数中出现两次. 在乘积表示空间权为 $(1,1)$ 的态出现四次. 在 E_1 作用下为零的乘积状态组合有四组

$$
\begin{aligned}
&|1,1\rangle \; |(0,0)_2\rangle \; , \qquad && |1,1\rangle \; |(0,0)_1\rangle - \sqrt{2} \; |\overline{1},2\rangle \; |2,\overline{1}\rangle, \\
&|(0,0)_2\rangle \; |1,1\rangle \; , \qquad && |(0,0)_1\rangle \; |1,1\rangle - \sqrt{2} \; |2,\overline{1}\rangle \; |\overline{1},2\rangle
\end{aligned}
$$

进一步要求在 E_2 作用下为零, 这样的组合有两组

$$
\begin{aligned}
&-|1,1\rangle|(0,0)_2\rangle + \sqrt{3}|1,1\rangle|(0,0)_1\rangle - \sqrt{6}|\overline{1},2\rangle|2,\overline{1}\rangle + 2|(0,0)_2\rangle|1,1\rangle, \\
&2|1,1\rangle|(0,0)_2\rangle - \sqrt{6}|2,\overline{1}\rangle|\overline{1},2\rangle + \sqrt{3}|(0,0)_1\rangle|1,1\rangle - |(0,0)_2\rangle|1,1\rangle
\end{aligned}
$$

把它们组合成对称和反对称的形式, 归一化后作为两个表示 $(1,1)$ 的最高权态展开式, 并分别标以下标 S 和 A

$$
\begin{aligned}
\|(1,1),(1,1)\rangle_S = \sqrt{1/20} \; &\{\sqrt{3} \; |1,1\rangle \; |(0,0)_1\rangle + |1,1\rangle \; |(0,0)_2\rangle - \sqrt{6} \; |\overline{1},2\rangle \; |2,\overline{1}\rangle \\
&-\sqrt{6} \; |2,\overline{1}\rangle|\overline{1},2\rangle + |(0,0)_2\rangle \; |1,1\rangle + \sqrt{3} \; |(0,0)_1\rangle \; |1,1\rangle\}, \\
\|(1,1),(1,1)\rangle_A = \sqrt{1/12} \; &\{ \; |1,1\rangle \; |(0,0)_1\rangle - \sqrt{3} \; |1,1\rangle \; |(0,0)_2\rangle - \sqrt{2} \; |\overline{1},2\rangle \; |2,\overline{1}\rangle \\
&+\sqrt{2} \; |2,\overline{1}\rangle \; |\overline{1},2\rangle + \sqrt{3} \; |(0,0)_2\rangle \; |1,1\rangle - |(0,0)_1\rangle \; |1,1\rangle\}
\end{aligned}
$$

恒等表示 (0, 0) 是对称表示, 它的状态展开式经计算为

$$
\begin{aligned}
\|(0,0),(0,0)\rangle = \sqrt{1/8} \; &\{ \; |1,1\rangle \; |\overline{1},\overline{1}\rangle - |\overline{1},2\rangle \; |1,\overline{2}\rangle - |2,\overline{1}\rangle \; |\overline{2},1\rangle + |(0,0)_1\rangle \; |(0,0)_1\rangle \\
&+|(0,0)_2\rangle \; |(0,0)_2\rangle - |\overline{2},1\rangle \; |2,\overline{1}\rangle - |1,\overline{2}\rangle \; |\overline{1},2\rangle + |\overline{1},\overline{1}\rangle \; |1,1\rangle\}
\end{aligned}
$$

五、G_2 李代数表示的直乘分解

讨论 G_2 李代数直乘表示 $(0,1) \times (0,1)$ 的分解. 根据表示 $(0,1)$ 的方块权图 (见图 7.5), 在直乘表示空间里出现的主权有 $(0,2)$, $(1,0)$, $(0,1)$ 和 $(0,0)$, 它们的重数分

别是 1, 2, 4 和 7, 外尔轨道长度分别是 6, 6, 6 和 1. 因为参加直乘的两个表示是相同的, 下面列举主权对应的独立状态基时, 省略因 $|\boldsymbol{m}^{(1)}\rangle$ 和 $|\boldsymbol{m}^{(2)}\rangle$ 交换得到的状态基.

主权	重数	独立状态基
(0,2)	1	$\|(0,1)\rangle\|(0,1)\rangle$,
(1,0)	2	$\|(0,1)\rangle\|(1,\overline{1})\rangle$,
(0,1)	4	$\|(0,1)\rangle\|(0,0)\rangle$, $\|(1,\overline{1})\rangle\|(\overline{1},2)\rangle$,
(0,0)	7	$\|(1,1)\rangle\|(\overline{1},\overline{1})\rangle$, $\|(1,\overline{1})\rangle\|(\overline{1},1)\rangle$,
		$\|(\overline{1},2)\rangle\|(1,\overline{2})\rangle$, $\|(0,0)\rangle\|(0,0)\rangle$

乘积表示空间最高权等于参加乘积的两表示最高权相加

$$||(0,2),(0,2)\rangle = |(0,1),(0,1)\rangle|(0,1),(0,1)\rangle \equiv |(0,1)\rangle|(0,1)\rangle$$

图 7.8 给出了表示 $(0,2)$ 的平面权图. 从图中知道, 表示 $(0,2)$ 包含四个主权, $(0,2)$ 和 $(1,0)$ 是单权, $(0,1)$ 是二重权, $(0,0)$ 是三重权. 由此可画出直乘表示分解的主权图 (见图 7.11).

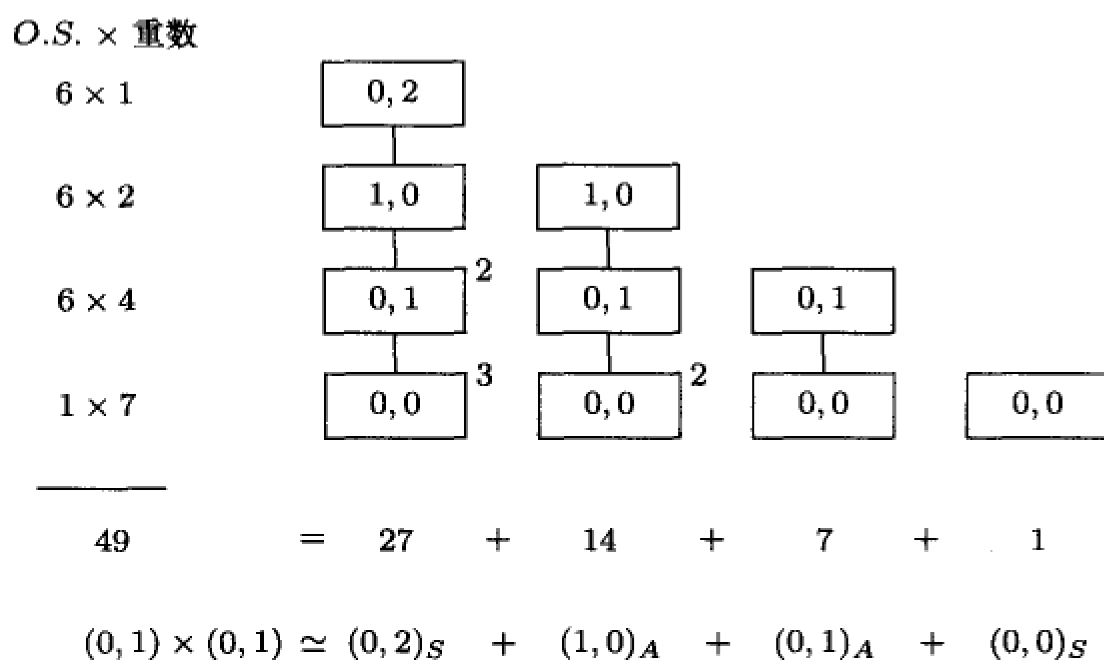


图 7.11 G_2 李代数直乘表示 $(0,1)\times(0,1)$ 分解的主权图

根据升算符作用得零的条件, 可算出克莱布施 - 戈登级数中出现的各不可约表示的最高权态展开式. 主权 $(1,0)$ 有两个独立态, 要求 E_2 作用为零, 得最高权态的展开式为

$$||(1,0),(1,0)\rangle = \sqrt{1/2}\left\{|(0,1)\rangle|(1,\overline{1})\rangle - |(1,\overline{1})\rangle|(0,1)\rangle\right\}$$

表示 $(1,0)$ 对乘积状态交换是反对称的. 主权 $(0,1)$ 有四个独立态. 在 E_2 作用下为

零的组合有两组

$$|(0,1)\rangle|(0,0)\rangle - \sqrt{2}\ |(1,\overline{1})\rangle|(\overline{1},2)\rangle\ , \qquad \sqrt{2}\ |(\overline{1},2)\rangle|(1,\overline{1})\rangle - |(0,0)\rangle\ |(0,1)\rangle$$

进一步要求 E_1 作用为零, 归一化后得

$$\begin{aligned}||(0,1),(0,1)\rangle = \sqrt{1/6}\,\{&|(0,1)\rangle|(0,0)\rangle - \sqrt{2}\ |(1,\overline{1})\rangle|(\overline{1},2)\rangle \\ &+\sqrt{2}\ |(\overline{1},2)\rangle|(1,\overline{1})\rangle - |(0,0)\rangle|(0,1)\rangle\}\end{aligned}$$

表示 $(0,1)$ 对乘积状态交换也是反对称的. 最后, 恒等表示 $(0,\ 0)$ 的状态基展开式对乘积状态交换是对称的

$$\begin{aligned}||(0,0),(0,0)\rangle = \sqrt{1/7}\,\{&|(0,1)\rangle|(0,\overline{1})\rangle - |(1,\overline{1})\rangle|(\overline{1},1)\rangle + |(\overline{1},2)\rangle|(1,\overline{2})\rangle \\ &-|(0,0)\rangle|(0,0)\rangle + |(1,\overline{2})\rangle|(\overline{1},2)\rangle - |(\overline{1},1)\rangle|(1,\overline{1})\rangle + |(0,\overline{1})\rangle|(0,1)\rangle\ \}\end{aligned}$$

其他状态基的展开式可用降算符作用得到.

习　题

1. 由根 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 组成的根链 $\boldsymbol{\alpha}+n\boldsymbol{\beta}$, $-q \leqslant n \leqslant p$, 根链长度为 $p+q+1$. 证明单纯李代数的根链长度不大于 4.

2. 画出 C_2 李代数的两个基本表示 $(1,0)$, $(0,1)$ 和伴随表示 $(2,0)$ 的方块权图和平面权图.

3. 计算 C_2 李代数直乘表示 $(1,0)\times(1,0)$ 分解的克莱布施 – 戈登级数和克莱布施 – 戈登系数.

4. 计算 C_2 李代数直乘表示 $(0,1)\times(0,1)$ 分解的克莱布施 – 戈登级数和克莱布施 – 戈登系数.

5. C_ℓ 李代数的素根还可以用式 (7.85) 给出的 $\ell+1$ 个基 $\boldsymbol{V}_j$ 表出

$$\boldsymbol{r}_j = \boldsymbol{V}_j - \boldsymbol{V}_{j+1}\ , \qquad 1 \leqslant j \leqslant (\ell-1)\ , \qquad \boldsymbol{r}_\ell = 2\boldsymbol{V}_\ell - \frac{2}{\ell}\left(\sqrt{\ell+1}-1\right)\boldsymbol{V}_{\ell+1}$$

试计算 C_ℓ 代数的基本主权 $\boldsymbol{w}_j$ 和全部根矢量 [可利用式 (7.116) 的结果].

6. 利用式 (7.145) 分别计算 SO(N) 群如下各最高权表示 $\boldsymbol{M} = \sum_{\mu=1}^{\ell} M_\mu \boldsymbol{w}_\mu$ 的二阶卡西米尔不变量 $C_2(\boldsymbol{M})$:

(1) $N = 2\ell+1$ 和 $\boldsymbol{M} = \sum_{\mu=1}^{\ell-1}\ (\lambda_\mu - \lambda_{\mu+1})\,\boldsymbol{w}_\mu + 2\lambda_\ell \boldsymbol{w}_\ell$,

(2) $N = 2\ell+1$ 和 $\boldsymbol{M} = \lambda_1 \boldsymbol{w}_1 + \boldsymbol{w}_\ell$,

(3) $N = 2\ell$ 和 $\boldsymbol{M} = \sum_{\mu=1}^{\ell-1}\ (\lambda_\mu - \lambda_{\mu+1})\,\boldsymbol{w}_\mu + (\lambda_{\ell-1}+\lambda_\ell)\,\boldsymbol{w}_\ell$,

(4) $N = 2\ell$ 和 $\boldsymbol{M} = \lambda_1 \boldsymbol{w}_1 + \boldsymbol{w}_\ell$.

7. 计算 G_2 李代数直乘表示 $(1,0)\times(1,0)$ 和 $(1,0)\times(0,1)$ 分解的克莱布施 – 戈登级数和级数中出现的各表示最高权态的展开式, 其中各有关表示维数, 外尔轨道长度 $(O.S.)$ 和包含各主权重数列于下表.

表示	维数	$O.S.$	$(0,0)$	$(0,1)$	$(1,0)$	$(0,2)$	$(1,1)$	$(0,3)$	$(2,0)$
$(0,0)$	1	1	1						
$(0,1)$	7	6	1	1					
$(1,0)$	14	6	2	1	1				
$(0,2)$	27	6	3	2	1	1			
$(1,1)$	64	12	4	4	2	2	1		
$(0,3)$	77	6	5	4	3	2	1	1	
$(2,0)$	77	6	5	3	3	2	1	1	1

8. 计算 F_4 李代数直乘表示 $(0,0,0,1)\times(0,0,0,1)$ 分解的克莱布施 – 戈登级数和级数中出现的各表示最高权态的展开式, 其中各有关表示维数, 外尔轨道长度 $(O.S.)$ 和包含各主权重数列于下表.

表示	维数	$O.S.$	$(0,0,0,0)$	$(0,0,0,1)$	$(1,0,0,0)$	$(0,0,1,0)$	$(0,0,0,2)$
$(0,0,0,0)$	1	1	1				
$(0,0,0,1)$	26	24	2	1			
$(1,0,0,0)$	52	24	4	1	1		
$(0,0,1,0)$	273	96	9	5	2	1	
$(0,0,0,2)$	324	24	12	5	3	1	1

*第八章　SU(N) 群

SU(N) 群是紧致的单纯李群, 它的李代数是 A_{N-1}. 方块权图方法可以计算单纯李群不可约表示状态基的权和生成元在这组状态基里的表示矩阵, 但对状态基的波函数形式没有提供具体信息. 本章研究 SU(N) 群张量空间的约化, 用杨算符方法确定它的不可约张量子空间, 计算这些张量子空间中的独立和完备的张量基, 并与方块权图方法结合起来, 把这些不可约张量基正交归一化, 具体给出不可约表示状态基的波函数. 此外, 本章还讨论 SU(N) 群不可约表示的性质及其应用.

8.1　SU(N) 群的不可约表示

附录 15 已经一般地讨论过张量的概念, 现在研究 SU(N) 群的张量. SU(N) 群元素是 $N\times N$ 矩阵, 它的变换空间是 N 维复空间, 这空间的矢量有 N 个复分量, 在 $u\in$SU(N) 变换中按下式变换

$$\boldsymbol{V}_a \xrightarrow{u} \boldsymbol{V}'_a \equiv (O_u\boldsymbol{V})_a = \sum_{b=1}^{N} u_{ab}\boldsymbol{V}_b \tag{8.1}$$

SU(N) 群的 n 阶张量 $\boldsymbol{T}_{a_1,\cdots,a_n}$ 有 n 个指标, N^n 个分量, 在 SU(N) 变换 u 中, 每个指标都像矢量指标一样变换

$$\boldsymbol{T}_{a_1\cdots a_n} \xrightarrow{u} (O_u\boldsymbol{T})_{a_1\cdots a_n} = \sum_{b_1\cdots b_n} u_{a_1b_1}\cdots u_{a_nb_n}\boldsymbol{T}_{b_1\cdots b_n} \tag{8.2}$$

也就是说, SU(N) 群的 n 阶张量空间对应的表示是 n 个自身表示的直乘表示. 直乘表示一般是可约表示. 在第四章我们已经知道, SU(2) 群的任意表示 $D^j[SU(2)]$ 都可以在自身表示的多次直乘的表示分解中得到, 例如

$$D^{1/2}\times D^{1/2}\times D^{1/2}\simeq D^{3/2}\oplus 2\ D^{1/2}$$

$$D^{1/2}\times D^{1/2}\times D^{1/2}\times D^{1/2}\simeq D^{2}\oplus 3\ D^{1}\oplus 2\ D^{0}$$

因此, 我们希望在 SU(N) 群的张量空间约化中研究 SU(N) 群的不可约表示, 并计算不可约的张量基.

一、SU(N) 群张量空间的分解

n 阶张量的集合构成 N^n 维张量空间, 它是一个线性空间, 满足线性空间矢量相加和矢量与数相乘的一般规则. 张量空间关于 SU(N) 群的变换是不变的, 就是说,

张量空间的任一张量经任何 SU(N) 变换 u 的作用, 仍属于此张量空间. 在 SU(N) 变换式 (8.2) 中, 张量的每一个指标都平等地按 u 矩阵元素来组合. 这些 u 矩阵是以矩阵元素的形式出现在式 (8.2) 中的, 它们的乘积次序可以交换, 从而使张量指标间的对称性质在 SU(N) 变换中保持不变. 指标有一定对称性质的张量构成的张量子空间也在 SU(N) 变换中保持不变. 但是, 除了全对称张量和全反对称张量的意义已十分明确外, 具有混合对称性的张量的意义就不很明确. 例如, 对三阶张量, 让前两个指标对称, 再让后两个指标反对称, 此时前两个指标的对称性质已被破坏了.

张量指标之间的对称性质反映张量在指标间的置换变换 R 作用下的变换性质. 我们首先要明确地定义置换对张量的作用规则. 这是一个容易混淆的问题, 而且不同的文献可能有不同的规定. 张量 $\boldsymbol{T}$ 经置换 R 的作用变成新张量 $R\boldsymbol{T} \equiv \boldsymbol{T}_R$, 它的分量与原张量的分量存在一定的联系, 这联系必须满足群的性质, 就是说定义的变换规则对群元素乘积保持不变. 由于任何置换可表为若干对换的乘积, 而对换是自逆的, 对换对张量的作用规则比较容易定义. 对换 $(j\ k)$ 对张量 $\boldsymbol{T}$ 作用后得到的新张量 $\boldsymbol{T}'$ 做如下定义: 它分量的第 j 个指标和第 k 个指标交换后等于原张量 $\boldsymbol{T}$ 的相应分量

$$[(j\ k)\boldsymbol{T}]_{a_1\cdots a_j\cdots a_k\cdots a_n} = \boldsymbol{T}'_{a_1\cdots a_j\cdots a_k\cdots a_n} = \boldsymbol{T}_{a_1\cdots a_k\cdots a_j\cdots a_n} \tag{8.3}$$

举个简单的例子, 设

$$\begin{gathered}
R = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} = (1\ 2\ 3) = (1\ 2)(2\ 3), \\
[(2\ 3)\boldsymbol{T}]_{a_1a_2a_3} = \boldsymbol{T}'_{a_1a_2a_3} = \boldsymbol{T}_{a_1a_3a_2}, \\
(R\boldsymbol{T})_{a_1a_2a_3} = \left[(1\ 2)\boldsymbol{T}'\right]_{a_1a_2a_3} = \boldsymbol{T}'_{a_2a_1a_3} = \boldsymbol{T}_{a_2a_3a_1} \neq T_{a_3a_1a_2}
\end{gathered} \tag{8.4}$$

一般说来, 设

$$R = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ r_1 & r_2 & \cdots & r_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \overline{r}_1 & \overline{r}_2 & \cdots & \overline{r}_n \\ 1 & 2 & \cdots & n \end{pmatrix} \tag{8.5}$$

$$(R\boldsymbol{T})_{a_1\cdots a_n} \equiv (\boldsymbol{T}_R)_{a_1\cdots a_n} = \boldsymbol{T}_{a_{r_1}\cdots a_{r_n}} \neq \boldsymbol{T}_{a_{\overline{r}_1}\cdots a_{\overline{r}_n}} \tag{8.6}$$

请注意, R 对 $\boldsymbol{T}$ 作用后, 并不是把第 j 个指标 a_j 移到第 r_j 位置, 而是把第 r_j 个指标 a_{r_j} 移到第 j 位置. n 阶张量指标之间的任意置换 R 的集合构成 n 个客体置换群 S_n. n 阶张量经过置换 R 的作用, 仍是一个 n 阶张量, 因而 n 阶张量空间对置换群 S_n 也是保持不变的.

一个二阶张量分解为对称张量和反对称张量之和的方法是大家熟知的

$$\boldsymbol{T}_{ab} = \frac{1}{2}\left\{\boldsymbol{T}_{ab} + \boldsymbol{T}_{ba}\right\} + \frac{1}{2}\left\{\boldsymbol{T}_{ab} - \boldsymbol{T}_{ba}\right\}$$

现在我们要用置换算符的作用, 重新理解这一分解过程

$$\begin{aligned} \boldsymbol{T}_{ab} &= \frac{1}{2}\{E+(1\ 2)\}\boldsymbol{T}_{ab}+\frac{1}{2}\{E-(1\ 2)\}\boldsymbol{T}_{ab} \\ &= \frac{1}{2}\left\{\mathcal{Y}^{[2]}+\mathcal{Y}^{[1,1]}\right\}\boldsymbol{T}_{ab}=E\boldsymbol{T}_{ab} \end{aligned} \tag{8.7}$$

恒元 E 分解为杨算符的组合. 杨算符是投影算符, 它们把任意二阶张量分别投影成对称张量和反对称张量. 这样的方法是很容易推广到任意阶张量的. 利用置换群恒元按杨算符的展开式, 可把 n 阶张量分解为用杨算符投影得到的有确定对称性的张量之和

$$\boldsymbol{T}_{a_1\cdots a_n}=E\boldsymbol{T}_{a_1\cdots a_n}=\frac{1}{n!}\sum_{[\lambda]} d_{[\lambda]}\sum_{\mu} \mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}y_{\mu}^{[\lambda]}\boldsymbol{T}_{a_1\cdots a_n} \tag{8.8}$$

例如, 一个三阶张量可做如下分解

$$\boldsymbol{T}_{abc}=\frac{1}{6}\mathcal{Y}^{[3]}\boldsymbol{T}_{abc}+\frac{1}{3}\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\boldsymbol{T}_{abc}+\frac{1}{3}\mathcal{Y}_2^{[2,1]}\boldsymbol{T}_{abc}+\frac{1}{6}\mathcal{Y}^{[1,1,1]}\boldsymbol{T}_{abc} \tag{8.9}$$

三阶张量 $\boldsymbol{T}_{abc}$ 分解为四个张量之和, 第一项是完全对称张量, 第四项是完全反对称张量, 中间两项的张量具有新的对称性质, 称为混合对称张量. 把杨算符作用到 n 阶张量空间 $\mathcal{T}$ 上, 就把张量空间分解为若干个张量子空间的直和

$$\mathcal{T}=E\mathcal{T}=\frac{1}{n!}\bigoplus_{[\lambda]} d_{[\lambda]}\bigoplus_{\mu} \mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}y_{\mu}^{[\lambda]}\boldsymbol{T}=\bigoplus_{[\lambda]}\bigoplus_{\mu} \mathcal{T}_{\mu}^{[\lambda]} \tag{8.10}$$

这里有几点需要强调一下. 第一, 由于杨算符的正交性, 这些张量子空间没有公共矢量, 因而它们作为张量空间 $\mathcal{T}$ 的子空间是直和的关系. 第二, 作为子空间, 前面的常系数 $d_{[\lambda]}/n!$ 显然是不重要的, 而且容易证明, $y_{\mu}^{[\lambda]}$ 也可略去

$$\mathcal{T}_{\mu}^{[\lambda]}=\frac{d_{[\lambda]}}{n!}\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}y_{\mu}^{[\lambda]}\mathcal{T}=\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}y_{\mu}^{[\lambda]}\mathcal{T}=\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}\mathcal{T} \tag{8.11}$$

要证明两个空间相等, 就是要证明它们互为子空间. 因为 $y_{\mu}^{[\lambda]}\mathcal{T}\subset\mathcal{T}$, 有

$$\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}\left\{y_{\mu}^{[\lambda]}\mathcal{T}\right\}\subset\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}\mathcal{T}$$

同理, $\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}\mathcal{T}\subset\mathcal{T}$,

$$\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}\mathcal{T}=\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}y_{\mu}^{[\lambda]}\left\{\frac{d_{[\lambda]}}{n!}\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}\mathcal{T}\right\}\subset\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}y_{\mu}^{[\lambda]}\mathcal{T}$$

式 (8.11) 得证. 同样方法可证

$$R\mathcal{T}=\mathcal{T},\qquad R\in \mathrm{S}_n. \tag{8.12}$$

第三, 要证明这些张量子空间对 SU(N) 变换保持不变.

定理一 (外尔互反性 Weyl reciprocity) 张量分量指标间的置换变换 R 和张量的 SU(N) 变换 O_u 作用次序可以交换.

证明 证明的关键在于, 作为矩阵元素, 在式 (8.2) 中 u_{ab} 的乘积次序是可以交换的, 即

$$\begin{aligned}(O_u R\boldsymbol{T})_{a_1\cdots a_n} &= (O_u \boldsymbol{T}_R)_{a_1\cdots a_n} = \sum_{b_1\cdots b_n} u_{a_1b_1}\cdots u_{a_nb_n}(\boldsymbol{T}_R)_{b_1\cdots b_n} \\ &= \sum_{b_1\cdots b_n} u_{a_{r_1}b_{r_1}}\cdots u_{a_{r_n}b_{r_n}}\boldsymbol{T}_{b_{r_1}\cdots b_{r_n}} = (O_u\boldsymbol{T})_{a_{r_1}\cdots a_{r_n}} = (RO_u\boldsymbol{T})_{a_1\cdots a_n}\end{aligned} \tag{8.13}$$

证完.

既然张量分量指标间的置换变换可以和张量的 SU(N) 变换交换次序, 杨算符的投影也可以和张量的 SU(N) 变换交换次序, 因而属于张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 的张量经 SU(N) 变换后仍属此子空间

$$O_u\left\{\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\boldsymbol{T}\right\} = \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\left\{O_u\boldsymbol{T}\right\} \subset \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\mathcal{T} = \mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$$

这就证明了这些张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 对 SU(N) 变换保持不变.

对张量子空间 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\mathcal{T}$, 由于式 (8.12), 在杨算符右面乘置换 R, 不改变张量子空间. 在杨算符左面乘置换, 一般会使张量子空间做整体的变换, 但由于外尔互反性, 它不会改变张量子空间内各张量在 SU(N) 变换中的相对变换规律

$$\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}R\mathcal{T} = \mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}\ , \qquad R_{\nu\mu}\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\mathcal{T} = \mathcal{Y}_\nu^{[\lambda]}R_{\nu\mu}\mathcal{T} = \mathcal{T}_\nu^{[\lambda]} \tag{8.14}$$

其中, $R_{\nu\mu}$ 是把正则杨表 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}$ 变成正则杨表 $\mathcal{Y}_\nu^{[\lambda]}$ 的置换.

二、张量子空间的张量基

研究张量子空间的完备的张量基, 是研究 SU(N) 群不等价不可约表示的需要, 也是物理上计算属不可约表示的状态波函数的需要. 我们先来复习一下矢量基的概念, 然后再推广到张量基, 并确定在一个张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 中哪些张量基是线性无关的和完备的.

矢量基是一类特殊的矢量, 它只有一个分量不为 0, 而等于 1. 任何矢量可按矢量基展开

$$(\boldsymbol{\Theta}_d)_a = \delta_{da}\ , \qquad \boldsymbol{V} = \sum_{d=1}^{N} V_d\boldsymbol{\Theta}_d\ , \qquad (\boldsymbol{V})_a = \sum_{d=1}^{N} V_d(\boldsymbol{\Theta}_d)_a = V_a \tag{8.15}$$

以实三维空间来理解这些公式 (见第四章), $\boldsymbol{\Theta}_d$ 可以理解为固定在系统上的动坐标系轴向单位矢量 $\vec{e}_d$, 转动前与定坐标系单位矢量重合, 转动中随系统而转动. 矢

量$\boldsymbol{V}$和单位矢量 $\vec{e}'_d$ 都固定在动坐标系中, 它们之间的关系不随转动而变化, 也就是说 V_d 不随转动而变化. $(\boldsymbol{V})_a$ 和 V_a 在数值上虽然相同, 但意义是不同的. 可以理解为 $(\boldsymbol{V})_a$ 是矢量 $\boldsymbol{V}$ 沿定坐标系轴向的分量, 它们随矢量的转动而变化. V_a 是矢量 $\boldsymbol{V}$ 沿动坐标系轴向的分量, 它们在转动中不变化. 转动前动坐标系和定坐标系重合, 因而 $(\boldsymbol{V})_a$ 和 V_a 数值上相等.

现在推广到张量基. 张量基也是只有一个分量不为 0(等于 1) 的张量, 任何张量可按张量基展开

$$\left(\boldsymbol{\Theta}_{d_1\cdots d_n}\right)_{a_1\cdots a_n}=\delta_{d_1a_1}\delta_{d_2a_2}\cdots\delta_{d_na_n}=\left(\boldsymbol{\Theta}_{d_1}\right)_{a_1}\left(\boldsymbol{\Theta}_{d_2}\right)_{a_2}\cdots\left(\boldsymbol{\Theta}_{d_n}\right)_{a_n} \tag{8.16}$$

$$\boldsymbol{T}_{a_1\cdots a_n}=\sum_{d_1\cdots d_n}T_{d_1\cdots d_n}\left(\boldsymbol{\Theta}_{d_1\cdots d_n}\right)_{a_1\cdots a_n}=T_{a_1\cdots a_n} \tag{8.17}$$

同样请注意 $\boldsymbol{T}_{a_1\cdots a_n}$ 和 $T_{a_1\cdots a_n}$ 在意义和变化规律上的不同.

作为一个张量, 在 SU(N) 变换中张量基服从张量的变换规律式 (8.2)

$$\begin{aligned}\left(O_u\boldsymbol{\Theta}_{d_1\cdots d_n}\right)_{a_1\cdots a_n}&=\sum_{b_1\cdots b_n}u_{a_1b_1}\cdots u_{a_nb_n}\left(\boldsymbol{\Theta}_{d_1\cdots d_n}\right)_{b_1\cdots b_n}\\&=u_{a_1d_1}\cdots u_{a_nd_n}=\sum_{b_1\cdots b_n}\left(\boldsymbol{\Theta}_{b_1\cdots b_n}\right)_{a_1\cdots a_n}u_{b_1d_1}\cdots u_{b_nd_n}\end{aligned}$$

$$O_u\boldsymbol{\Theta}_{d_1\cdots d_n}=\sum_{b_1\cdots b_n}\boldsymbol{\Theta}_{b_1\cdots b_n}u_{b_1d_1}\cdots u_{b_nd_n} \tag{8.18}$$

这就是我们常说的, 张量分量变换按列指标求和, 张量基变换按行指标求和. 对置换变换式 (8.5), 由式 (8.6), 张量基做如下变换

$$\begin{aligned}\left(R\boldsymbol{\Theta}_{d_1\cdots d_n}\right)_{a_1\cdots a_n}&=\left(\boldsymbol{\Theta}_{d_1\cdots d_n}\right)_{a_{r_1}\cdots a_{r_n}}\\&=\delta_{d_1a_{r_1}}\delta_{d_2a_{r_2}}\cdots\delta_{d_na_{r_n}}=\delta_{d_{\overline{r}_1}a_1}\delta_{d_{\overline{r}_2}a_2}\cdots\delta_{d_{\overline{r}_n}a_n}=\left(\boldsymbol{\Theta}_{d_{\overline{r}_1}\cdots d_{\overline{r}_n}}\right)_{a_1\cdots a_n}\end{aligned}$$

$$R\boldsymbol{\Theta}_{d_1\cdots d_n}=\boldsymbol{\Theta}_{d_{\overline{r}_1}\cdots d_{\overline{r}_n}}\neq\boldsymbol{\Theta}_{d_{r_1}\cdots d_{r_n}} \tag{8.19}$$

经置换 R, 张量基 $\boldsymbol{\Theta}_{d_1\cdots d_n}$ 变成了另一个张量基 $\boldsymbol{\Theta}_{d_{\overline{r}_1}\cdots d_{\overline{r}_n}}$, 其中第 j 个指标 d_j 移到了第 r_j 位置, 而第 $\overline{r}_j$ 个指标 $d_{\overline{r}_j}$ 移到了第 j 位置. 这样的变换才满足群的性质. 再举式 (8.4) 的简单例子. 取 $R=(1\ 2\ 3)=(1\ 2)(2\ 3)$,

$$(2\ 3)\boldsymbol{\Theta}_{a_1a_2a_3}=\boldsymbol{\Theta}_{a_1a_3a_2},\qquad R\boldsymbol{\Theta}_{a_1a_2a_3}=(1\ 2)\boldsymbol{\Theta}_{a_1a_3a_2}=\boldsymbol{\Theta}_{a_3a_1a_2}\neq\boldsymbol{\Theta}_{a_2a_3a_1}$$

应该强调, 虽然表现形式有所不同, 式 (8.18) 和 (8.2) 是统一的, 式 (8.19) 和 (8.6) 是统一的.

$\Theta_{a_1\cdots a_n}$ 是张量空间 $\mathcal{T}$ 的张量基, 用杨算符投影后, $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\Theta_{a_1\cdots a_n}$ 是张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 的张量基. 当然, 由于子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 的维数比 $\mathcal{T}$ 小, 张量基 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\Theta_{a_1\cdots a_n}$ 中, 有些会等于零, 有些会线性相关, 对给定的张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$, 我们要找出哪些张量基是线性无关的, 构成张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 的完备基.

首先, 讨论杨算符对张量基的投影如何计算和描写. 杨算符可表为横算符和纵算符的乘积. 横算符 $\mathcal{P}$ 是杨表各行数字 (客体) 的全对称算符的乘积, 纵算符 $\mathcal{Q}$ 是杨表各列数字 (客体) 的全反对称算符的乘积. 在计算杨算符对张量基的作用时, 不要把杨算符完全展开, 而是把各个全对称算符和全反对称算符逐个作用到张量基上, 把张量基的有关指标全对称化或全反对称化. 例如, 对应杨表为 $\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3&5\\\cline{1-2}\end{array}$ 的杨算符 $\mathcal{Y}$ 作用在 SU(3) 群五阶张量的张量基 Θ_{11233} 上, 得

$$\begin{aligned}
\mathcal{Y}\Theta_{11233} &= [E+(1\ 2)+(1\ 4)+(2\ 4)+(1\ 2\ 4)+(2\ 1\ 4)]\,[E+(3\ 5)] \\
&\quad\times\ [E-(1\ 3)]\,[E-(2\ 5)]\,\Theta_{11233} \\
&= [E+(3\ 5)]\,[E+(1\ 2)+(1\ 4)+(2\ 4)+(1\ 2\ 4)+(2\ 1\ 4)] \\
&\quad\times\ [\Theta_{11233}-\Theta_{13231}-\Theta_{21133}+\Theta_{23131}] \\
&= 2\,[\Theta_{11233}+\Theta_{31213}+\Theta_{13213}]+2\,[\Theta_{11332}+\Theta_{31312}+\Theta_{13312}] \\
&\quad -2\,[\Theta_{13231}+\Theta_{31231}+\Theta_{33211}]-2\,[\Theta_{13132}+\Theta_{31132}+\Theta_{33112}] \\
&\quad -[\Theta_{21133}+\Theta_{12133}+\Theta_{13123}+\Theta_{31123}+\Theta_{23113}+\Theta_{32113}] \\
&\quad -[\Theta_{21331}+\Theta_{12331}+\Theta_{13321}+\Theta_{31321}+\Theta_{23311}+\Theta_{32311}] \\
&\quad +4\,[\Theta_{23131}+\Theta_{32131}+\Theta_{33121}]
\end{aligned} \tag{8.20}$$

第二, 这样的展开式一般都很长, 为了简化符号, 也为了便于分析此展开式的性质, 我们采用图解方法来描写类似式 (8.20) 的张量基展开式. 对张量 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\Theta_{a_1\cdots a_n}$, 把数 $a_1\cdots a_n$ 按照杨表 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}$ 的填数次序填入杨图 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}$ 中, 就是说, 在杨表 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}$ 中填 j 的格子中填上 a_j. 用这样得到的杨表来描写张量 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\Theta_{a_1\cdots a_n}$, 称为张量杨表. 例如, 式 (8.20) 的张量用张量杨表 $\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&1&3\\\hline 2&3\\\cline{1-2}\end{array}$ 描写. 又如, 对正则杨表 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}$

$$\text{杨表 } \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} = \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&6\\\hline 3&5&7\\\hline 4\\\cline{1-1}\end{array}$$

张量 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\Theta_{a_1\cdots a_7}$ 用如下张量杨表描写

$$\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\Theta_{a_1\cdots a_7} = \begin{array}{|c|c|c|}\hline a_1&a_2&a_6\\\hline a_3&a_5&a_7\\\hline a_4\\\cline{1-1}\end{array}$$

张量杨表描写在给定张量子空间中的一个张量, 它是若干张量基 $\Theta_{a_1\cdots a_n}$ 的线性组合. 对于给定的杨图, 在不同的张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]} = \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\mathcal{T}$ 中, 同一个张量杨表描写不同的张量. 例如, SU(3) 群的三阶张量子空间 $\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\mathcal{T}$ 和 $\mathcal{Y}_2^{[2,1]}\mathcal{T}$ 中, 同一张量杨表 $\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array}$ 描写不同的张量

$$\text{杨表}\mathcal{Y}_1^{[2,1]} = \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array}\,, \quad \mathcal{Y}_1^{[2,1]}\Theta_{123} = \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array} = \Theta_{123} - \Theta_{321} + \Theta_{213} - \Theta_{231} \in \mathcal{Y}_1^{[2,1]}\mathcal{T}$$

$$\text{杨表}\mathcal{Y}_2^{[2,1]} = \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1}\end{array}\,, \quad \mathcal{Y}_2^{[2,1]}\Theta_{132} = \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array} = \Theta_{132} - \Theta_{312} + \Theta_{231} - \Theta_{213} \in \mathcal{Y}_2^{[2,1]}\mathcal{T}$$

它们可以通过置换 (2 3) 联系起来

$$(2\ 3)\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\Theta_{123} = \mathcal{Y}_2^{[2,1]}(2\ 3)\Theta_{123} = \mathcal{Y}_2^{[2,1]}\Theta_{132} \tag{8.21}$$

注意, 不要把张量杨表和第六章中的杨表发生混淆.

第三, 研究张量杨表的对称性质. 根据杨算符的对称性质式 (6.66) 和福克条件式 (6.69)

$$\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}Q = \delta(Q)\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\,, \qquad \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\left\{E - \sum_\mu (c_\mu\ d_\nu)\right\} = 0 \tag{8.22}$$

如果 Q_0 是杨表 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}$ 的纵向对换, 描写填在杨图 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}$ 同一列两个格子中数字的对换, 那么 Q_0 右乘到杨算符 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}$ 上产生负号, 而左乘到张量基上使张量杨表中填入那两个格子的数字对换. 因此, 张量杨表对填在同一列的数字交换是反对称的, 同一列有重复数字的张量杨表必为零, 张量杨表的行数不能大于 N. 福克条件也给出张量杨表间一定的关系式. 例如

$$\begin{array}{ll} \mathcal{Y}_1^{[2,1]}\Theta_{abc} = -\mathcal{Y}_1^{[2,1]}(1\ 3)\Theta_{abc}, & \mathcal{Y}_1^{[2,1]}\Theta_{abc} = \mathcal{Y}_1^{[2,1]}\left[(2\ 1) + (2\ 3)\right]\Theta_{abc} \\ \begin{array}{|c|c|}\hline a & b \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array} = -\begin{array}{|c|c|}\hline c & b \\ \hline a \\ \cline{1-1}\end{array}\,, & \begin{array}{|c|c|}\hline a & b \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array} = \begin{array}{|c|c|}\hline b & a \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array} + \begin{array}{|c|c|}\hline a & c \\ \hline b \\ \cline{1-1}\end{array} \end{array} \tag{8.23}$$

类似的关系在各种张量杨表中都存在. 在利用杨算符对称性质建立张量杨表的关系式时, 我们只能在杨算符右面乘置换元素, 因为只有这样的关系才给出同一张量子空间中张量间的联系. 在杨算符左面乘置换元素一般会超出此张量子空间. 若左乘的是杨算符的横向置换, 则张量杨表保持不变. 例如, 张量杨表 $\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\Theta_{abc}$ 对左乘 (1 2) 保持不变, 就是说它的展开式对前两个指标的对换保持不变, 但不是对 a 和 b 对换保持不变

$$\begin{aligned} (1\ 2)\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\Theta_{abc} &= (1\ 2)\left\{\Theta_{abc} - \Theta_{cba} + \Theta_{bac} - \Theta_{bca}\right\} \\ &= \Theta_{bac} - \Theta_{bca} + \Theta_{abc} - \Theta_{cba} = \mathcal{Y}_1^{[2,1]}\Theta_{abc} \end{aligned}$$

最后, 我们来研究在一个张量子空间 $\mathcal{T}_{\mu}^{[\lambda]}$ 中, 哪些张量杨表是线性无关的, 且构成张量子空间的一组完备基. 先举一个简单的例子. 讨论 SU(3) 群的张量子空间 $\mathcal{T}_1^{[2,1]}$, 张量杨表一般形式为

$$\begin{aligned}\begin{array}{|c|c|}\hline a&b\\\hline c\\\cline{1-1}\end{array} &= \mathcal{Y}_1^{[2,1]}\Theta_{abc} = \{E-(1\ 3)+(1\ 2)-(2\ 1)(1\ 3)\}\,\Theta_{abc} \\ &= \Theta_{abc}-\Theta_{cba}+\Theta_{bac}-\Theta_{bca}\end{aligned} \tag{8.24}$$

张量杨表满足式 (8.23), 特别是 a 和 c 交换反对称, 因而同一列填数不能相同. 当 a, b 和 c 都相等时, 张量杨表显然为零. 一对数相等时, 有

$$\begin{aligned}
\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\Theta_{112} &= \begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array} = -\begin{array}{|c|c|}\hline 2&1\\\hline 1\\\cline{1-1}\end{array} = 2\Theta_{112}-\Theta_{211}-\Theta_{121},\\
\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\Theta_{113} &= \begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array} = -\begin{array}{|c|c|}\hline 3&1\\\hline 1\\\cline{1-1}\end{array} = 2\Theta_{113}-\Theta_{311}-\Theta_{131},\\
\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\Theta_{122} &= \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array} = -\begin{array}{|c|c|}\hline 2&2\\\hline 1\\\cline{1-1}\end{array} = \Theta_{122}+\Theta_{212}-2\Theta_{221},\\
\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\Theta_{133} &= \begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array} = -\begin{array}{|c|c|}\hline 3&3\\\hline 1\\\cline{1-1}\end{array} = \Theta_{133}+\Theta_{313}-2\Theta_{331},\\
\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\Theta_{233} &= \begin{array}{|c|c|}\hline 2&3\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array} = -\begin{array}{|c|c|}\hline 3&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array} = \Theta_{233}+\Theta_{323}-2\Theta_{332},\\
\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\Theta_{223} &= \begin{array}{|c|c|}\hline 2&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array} = -\begin{array}{|c|c|}\hline 3&2\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array} = 2\Theta_{223}-\Theta_{322}-\Theta_{232}
\end{aligned}$$

三个指标取值都不同时, 有

$$\begin{aligned}
\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\Theta_{123} &= \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array} = -\begin{array}{|c|c|}\hline 3&2\\\hline 1\\\cline{1-1}\end{array} = \Theta_{123}-\Theta_{321}+\Theta_{213}-\Theta_{231}\\
\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\Theta_{132} &= \begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array} = -\begin{array}{|c|c|}\hline 2&3\\\hline 1\\\cline{1-1}\end{array} = \Theta_{132}-\Theta_{231}+\Theta_{312}-\Theta_{321}
\end{aligned}$$

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 2&1\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array} = -\begin{array}{|c|c|}\hline 3&1\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array} = \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array} - \begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array} = \Theta_{213}-\Theta_{312}+\Theta_{123}-\Theta_{132}$$

因此, 张量子空间 $\mathcal{T}_1^{[2,1]}$ 是八维的, 有八个线性无关的张量杨表. 这些线性无关的张量杨表有一个共同的特点, 就是在张量杨表的每一行中, 填在左面的数不大于填在

右面的数, 每一列中填在上面的数小于填在下面的数, 这样的张量杨表称为正则张量杨表. 下面做一般证明.

定理二 正则张量杨表构成张量子空间 $\mathcal{T}_{\mu}^{[\lambda]}$ 中的一组完备基.

证明 对于任意给出的张量基 $\Theta_{b_1\cdots b_n}$, 总可以通过某置换 S, 使分量指标按自小至大顺序排列

$$\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}\Theta_{b_1\cdots b_n}=\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}S\Theta_{a_1\cdots a_n}\ , \qquad a_1\leqslant a_2\leqslant\cdots\leqslant a_n$$

而在置换群中, 所有 $\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}S$ 都属于由正则杨算符 $\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}$ 生成的右理想, 可表为此右理想的基 $\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}R_{\mu\nu}$ 的线性组合, 因此, 张量子空间 $\mathcal{T}_{\mu}^{[\lambda]}$ 的任何张量杨表都可表为下面张量杨表的线性组合

$$\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}R_{\mu\nu}\Theta_{a_1\cdots a_n}\ , \qquad a_1\leqslant a_2\leqslant\cdots\leqslant a_n \tag{8.25}$$

张量杨表之间满足的关系式 (8.23) 都是由杨算符的性质得来的. 由式 (8.23), 同一列有相同填数的张量杨表必定为零. 只要 n 个 a_j 中有一个取值不同, 这些不为零的张量杨表显然是线性无关的. 当 a_j 的取值都相同时, 由于 $\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}R_{\mu\nu}$ 是线性无关的, 式 (8.25) 给出的不为零的张量杨表也是线性无关的. 因此, 这些不为零的张量杨表构成张量子空间 $\mathcal{T}_{\mu}^{[\lambda]}$ 的完备基, 现在要证明它们是正则张量杨表.

$R_{\mu\nu}$ 是把正则杨表 $\mathcal{Y}_{\nu}^{[\lambda]}$ 变成正则杨表 $\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}$ 的置换

$$\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}R_{\mu\nu}\Theta_{a_1\cdots a_n}=R_{\mu\nu}\left\{\mathcal{Y}_{\nu}^{[\lambda]}\Theta_{a_1\cdots a_n}\right\} \tag{8.26}$$

注意, 花括号中的张量不属于张量子空间 $\mathcal{T}_{\mu}^{[\lambda]}$, 而属于另一个张量子空间 $\mathcal{T}_{\nu}^{[\lambda]}$. 左乘置换 $R_{\mu\nu}$ 把不同张量子空间的张量联系起来了. 既然 $a_1\leqslant a_2\leqslant\cdots\leqslant a_n$, 而且 $\mathcal{Y}_{\nu}^{[\lambda]}$ 是正则杨表, 根据写张量杨表的规则, 花括号中的张量在张量子空间 $\mathcal{T}_{\nu}^{[\lambda]}$ 中的张量杨表, 在每一行左面的数不大于右面的数, 在每一列上面的数不大于下面的数. 既然它不为零, 同一列的填数不相同, 因而它是正则张量杨表. 下面只要证明, 式 (8.26) 中用 $R_{\mu\nu}$ 联系起来的两个张量, 在不同的张量子空间中, 对应的张量杨表刚好相同. 设

$$R_{\mu\nu}=\begin{pmatrix} s_1 & s_2 & \cdots & s_n \\ 1 & 2 & \cdots & n \end{pmatrix}, \qquad R_{\mu\nu}\Theta_{a_1\cdots a_n}=\Theta_{b_1\cdots b_n}\ , \qquad b_j=a_{s_j}$$

对于杨图中的任意一格, 设在杨表 $\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}$ 中填 j, 则在杨表 $\mathcal{Y}_{\nu}^{[\lambda]}$ 中填 s_j. 对这同一个格子, 在张量杨表 $\mathcal{Y}_{\nu}^{[\lambda]}\Theta_{a_1\cdots a_n}$ 中填 a_{s_j}, 在张量杨表 $\mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]}R_{\mu\nu}\Theta_{a_1\cdots a_n}$ 中填 $b_j=a_{s_j}$. 两个张量杨表填数相同. 证完.

三、SU(N) 群生成元的谢瓦莱基

式 (7.149) 给出了单纯李代数 (或单纯李群) 谢瓦莱基的定义, 现在具体应用到 SU(N) 群, 计算在自身表示中谢瓦莱基的矩阵形式. 应用式 (7.85) 给出的矢量基 $\boldsymbol{V}_a$, SU(N) 群的素根表为 [见式 (7.87)]

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{r}_\mu)_j &= \sqrt{2}\,[\boldsymbol{V}_\mu - \boldsymbol{V}_{\mu+1}]_j = \sqrt{2}\left[\left(T^{(3)}_{N-j+1}\right)_\mu - \left(T^{(3)}_{N-j+1}\right)_{\mu+1}\right] \\ &= \sqrt{\frac{\mu+1}{\mu}}\delta_{\mu(N-j)} - \sqrt{\frac{\mu-1}{\mu}}\delta_{\mu(N-j+1)}\end{aligned}$$

由于素根长度之半 $d_\mu = 1$, 在自身表示中的谢瓦莱基为 [见式 (7.83)]

$$\begin{aligned}&H_\mu = \sum_{j=1}^{\ell}(\boldsymbol{r}_\mu)_j\,H_j = \sqrt{\frac{2(\mu+1)}{\mu}}T^{(3)}_{\mu+1} - \sqrt{\frac{2(\mu-1)}{\mu}}T^{(3)}_{\mu} = T^{(1)}_{\mu\mu} - T^{(1)}_{(\mu+1)(\mu+1)}, \\ &E_\mu = F_\mu^\dagger = E_{\boldsymbol{\alpha}_{\mu(\mu+1)}} = T^{(1)}_{\mu(\mu+1)} + \mathrm{i}T^{(2)}_{\mu(\mu+1)}\end{aligned} \tag{8.27}$$

就是说, H_μ, E_μ 和 F_μ 在自身表示中的矩阵形式, 只有在 μ 和 $\mu+1$ 行列的一个二维子矩阵不为零, 这子矩阵正是 SU(2) 群自身表示的相应生成元矩阵 (7.152), 因而 H_μ, E_μ 和 F_μ 满足 SU(2) 群生成元的对易关系式 (7.153). 它们对矢量基的作用, 不为零的有

$$H_\mu\boldsymbol{\Theta}_\mu = \boldsymbol{\Theta}_\mu\ , \qquad H_\mu\boldsymbol{\Theta}_{\mu+1} = -\boldsymbol{\Theta}_{\mu+1}\ , \qquad E_\mu\boldsymbol{\Theta}_{\mu+1} = \boldsymbol{\Theta}_\mu\ , \qquad F_\mu\boldsymbol{\Theta}_\mu = \boldsymbol{\Theta}_{\mu+1} \tag{8.28}$$

在 SU(N) 变换中, 张量的每一个指标就像矢量指标一样按 SU(N) 群自身表示矩阵 u 变换. 生成元对张量基的作用, 是对每个指标作用后相加. 因此, 正则张量杨表正是 H_μ 的共同本征状态, 本征值等于正则张量杨表中填 μ 的格子数减去填 $\mu+1$ 的格子数. 这数值就是权分量 m_μ. 两个填数相同但排列次序不同的正则张量杨表对应相同的权, 因而是重权. E_μ 对正则张量杨表的作用得到一系列张量杨表之和, 其中每一个张量杨表都是分别把原来的正则张量杨表中一个填 $\mu+1$ 的格子换成填 μ. F_μ 的作用则是把填 μ 的格子换成填 $\mu+1$. 新得到的张量杨表可能不是正则的, 需用对称关系 (8.23) 化为正则张量杨表的组合. 例如, 对 SU(3) 群的张量杨表, 有

$$H_1\,\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 1 \\ \hline 3 & \multicolumn{1}{c}{} \\ \cline{1-1}\end{array} = 2\,\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 1 \\ \hline 3 & \multicolumn{1}{c}{} \\ \cline{1-1}\end{array}\,, \qquad H_2\,\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 1 \\ \hline 3 & \multicolumn{1}{c}{} \\ \cline{1-1}\end{array} = -\,\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 1 \\ \hline 3 & \multicolumn{1}{c}{} \\ \cline{1-1}\end{array}$$

$$
\begin{aligned}
&E_2 \begin{ytableau} 1 & 1 \\ 3 \end{ytableau} = \begin{ytableau} 1 & 1 \\ 2 \end{ytableau}, \qquad E_1 \begin{ytableau} 1 & 1 \\ 3 \end{ytableau} = F_2 \begin{ytableau} 1 & 1 \\ 3 \end{ytableau} = 0 \\
&F_1 \begin{ytableau} 1 & 1 \\ 3 \end{ytableau} = \begin{ytableau} 1 & 2 \\ 3 \end{ytableau} + \begin{ytableau} 2 & 1 \\ 3 \end{ytableau} = 2 \begin{ytableau} 1 & 2 \\ 3 \end{ytableau} + \begin{ytableau} 2 & 3 \\ 1 \end{ytableau} = 2 \begin{ytableau} 1 & 2 \\ 3 \end{ytableau} - \begin{ytableau} 1 & 3 \\ 2 \end{ytableau}
\end{aligned} \tag{8.29}
$$

四、张量子空间的不等价不可约性

对 SU(N) 变换不变的张量子空间, 它的张量基按 SU(N) 群的一个表示变换. 这表示称为此张量子空间对应的表示. 对应不可约表示的张量子空间称为不可约张量子空间. 对应表示等价的两个张量子空间称为等价的张量子空间.

定理三　用正则杨算符 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}$ 投影得到的 SU(N) 群张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]} = \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\mathcal{T}$ 对应 SU(N) 群的不可约表示. 表示可用杨图 $[\lambda]$ 标记, 表示的最高权 $\boldsymbol{M}$ 为

$$
\boldsymbol{M} = \sum_{\nu=1}^{N-1} M_\nu \boldsymbol{w}_\nu, \qquad M_\nu = \lambda_\nu - \lambda_{\nu+1} \tag{8.30}
$$

其中, λ_ν 是杨图 $[\lambda]$ 第 ν 行的格数, $\boldsymbol{w}_\nu$ 是基本主权. 有不同杨图 $[\lambda]$ 的张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 不等价. 有相同杨图 $[\lambda]$ 而不同 μ 的张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 等价, 而且这些张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 的对应基又构成置换群 S_n 不可约表示 $[\lambda]$ 的完备基. 杨图行数大于 N 的张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 是空集.

证明　在张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 中存在这样一个正则张量杨表, 它的每一格的填数等于格子所在的行数. 升算符 E_ν 对它的作用, 得到的每一项分别把一个填 $\nu+1$ 的格子变成填 ν, 由于 $\lambda_{\nu+1} \leqslant \lambda_\nu$, 这格子上面必另有填 ν 的格子, 故得到的张量杨表为零. 因此, 这正则张量杨表对应最高权态, 对应的最高权 $\boldsymbol{M}$ 由式 (8.30) 给出.

容易证明, 对其他正则张量杨表, 至少能找到一个升算符作用不为零. 不失普遍性, 设此正则张量杨表的前 $\nu-1$ 行的格子都填以行数, 第 ν 行至少有一格填数不为 ν, 例如为 $\tau > \nu$. 这格所在列其他格子的填数都不等于 $\tau-1$, 因为处在它上面的格子填数小于 $\nu \leqslant \tau-1$, 处在它下面的格子填数大于 τ. 因此这正则张量杨表在 E_τ 作用下不为零.

既然在张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 中只有一个正则张量杨表描写最高权态, 这不变子空间对应以最高权 $\boldsymbol{M}$ 标记的不可约表示. 有不同杨图 $[\lambda]$ 的张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 对应的表示最高权不同, 因而不等价. 有相同杨图 $[\lambda]$ 而不同 μ 的张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 对应的表示最高权相同, 因而等价. 这些等价的张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 中的相同正则张量杨表, 由于式 (8.26), 构成置换群 S_n 不可约表示 $[\lambda]$ 的完备基. 杨图行数大于 N 的张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 包含的所有正则张量杨表都是零, 因而是零空间. 证完.

五、张量子空间对应表示的维数

用杨图 $[\lambda]$ 标记的 SU(N) 群不可约表示的维数等于张量子空间 $\mathcal{T}_{\mu}^{[\lambda]}$ 中包含的正则张量杨表个数. 但这不便于计算. 这里提供一个计算 SU(N) 群不可约表示 $[\lambda]$ 维数的钩形 (hook) 规则. 希望读者在阅读本小节前, 先复习一下第六章介绍的计算置换群 S_n 不可约表示 $[\lambda]$ 维数的钩形规则.

对杨图的每一格, 定义钩形数 h_{ij} 和容度 m_{ij}. 第 i 行第 j 列格子的钩形数 h_{ij} 等于在第 i 行该格右面的格子数加上在第 j 列该格下面的格子数再加 1. 第 i 行第 j 列格子的容度 m_{ij} 等于该格所在列数减去所在行数, $m_{ij}=j-i$. 按照钩形规则, 用杨图 $[\lambda]$ 标记的 SU(N) 群不可约表示维数表成一个分数

$$d_{[\lambda]}(\mathrm{SU}(N))=\prod_{ij}\frac{N+m_{ij}}{h_{ij}}=\frac{Y_A^{[\lambda]}}{Y_h^{[\lambda]}} \tag{8.31}$$

分母的表 $Y_h^{[\lambda]}$ 是在杨图 $[\lambda]$ 各格填以该格的构形数 h_{ij}, 分母是表中所填数的乘积. 分子的表 $Y_A^{[\lambda]}$ 是在杨图 $[\lambda]$ 各格填以 N 和该格容度 m_{ij} 之和, 分子是表中所填数的乘积.

下面举几个例子. 一行的杨图描写完全对称张量, 维数为

$$d_{[n]}(\mathrm{SU}(N))=\prod_{j=1}^{n}\frac{N+j-1}{n-j+1}=\frac{(N+n-1)!}{n!(N-1)!}=\begin{pmatrix}N+n-1\\ n\end{pmatrix} \tag{8.32}$$

这结果可作如下理解. 对一行的杨图, 正则张量杨表的区别完全由相邻数的分界点位置决定. 共有 $N-1$ 个分界点, 加上 N 个格子, 共 $N+n-1$ 个位置, 则正则张量杨表数目就是在 $N+n-1$ 个位置中任选 $N-1$ 个分界点位置的组合数.

一列的杨图描写完全反对称张量, 它的正则张量杨表, 可由在 N 个数中任取 n 个数, 自小至大顺序填入杨表得到, 因此正则张量杨表数目等于 N 个数中取 n 个数的组合数

$$d_{[1^n]}(\mathrm{SU}(N))=\prod_{j=1}^{n}\frac{N-j+1}{n-j+1}=\frac{N!}{n!(N-n)!}=\begin{pmatrix}N\\ n\end{pmatrix},\qquad n\leqslant N \tag{8.33}$$

如果一列的杨图有 N 行, 对应的正则张量杨表只有一个, 记作 $\boldsymbol{E}=\mathcal{Y}^{[1^N]}\boldsymbol{\Theta}_{12\cdots N}$. 我们用两种方法证明张量 $\boldsymbol{E}$ 是关于 SU(N) 变换的不变张量. 因为 $\mathcal{Y}^{[1^N]}$ 是完全反对称算符, $\mathcal{Y}^{[1^N]}=\sum_{R\in S_N}\delta(R)R$, 有

$$\left(\mathcal{Y}^{[1^N]}\boldsymbol{\Theta}_{12\cdots N}\right)_{a_1\cdots a_N}=\epsilon_{a_1\cdots a_N}\ ,\qquad \mathcal{Y}^{[1^N]}\boldsymbol{\Theta}_{a_1\cdots a_N}=\epsilon_{a_1\cdots a_N}\left(\mathcal{Y}^{[1^N]}\boldsymbol{\Theta}_{12\cdots N}\right) \tag{8.34}$$

按张量基的变换规律式 (8.18), 由于外尔互反性

$$\begin{aligned}
O_u \boldsymbol{E} &= \mathcal{Y}^{[1^N]} O_u \Theta_{12\cdots N} = \sum_{a_1\cdots a_N} \left(\mathcal{Y}^{[1^N]} \Theta_{a_1\cdots a_N}\right) u_{a_1 1} \cdots u_{a_N N} \\
&= \left(\mathcal{Y}^{[1^N]} \Theta_{12\cdots N}\right) \sum_{a_1\cdots a_N} \epsilon_{a_1\cdots a_N} u_{a_1 1} \cdots u_{a_N N} \\
&= \left(\mathcal{Y}^{[1^N]} \Theta_{12\cdots N}\right) \det u = \mathcal{Y}^{[1^N]} \Theta_{12\cdots N} = \boldsymbol{E}
\end{aligned} \tag{8.35}$$

这里用到杨算符是线性算符, 对系数 $u_{a_j j}$ 不作用. 按张量分量的变换

$$\begin{aligned}
(O_u \boldsymbol{E})_{a_1\cdots a_N} &= \left(O_u \mathcal{Y}^{[1^N]} \Theta_{12\cdots N}\right)_{a_1\cdots a_N} = \sum_{b_1\cdots b_N} u_{a_1 b_1} \cdots u_{a_N b_N} \left(\mathcal{Y}^{[1^N]} \Theta_{12\cdots N}\right)_{b_1\cdots b_N} \\
&= \sum_{b_1\cdots b_N} u_{a_1 b_1} \cdots u_{a_N b_N} \epsilon_{b_1\cdots b_N} = \epsilon_{a_1\cdots a_N} \sum_{b_1\cdots b_N} u_{1 b_1} \cdots u_{N b_N} \epsilon_{b_1\cdots b_N} \\
&= \epsilon_{a_1\cdots a_N} \det u = \epsilon_{a_1\cdots a_N} = \left(\mathcal{Y}^{[1^N]} \Theta_{12\cdots N}\right)_{a_1\cdots a_N} = \boldsymbol{E}_{a_1\cdots a_N}
\end{aligned} \tag{8.36}$$

因此, N 行一列的杨图 $[1^N]$ 描写恒等表示, $\boldsymbol{E}$ 是 SU(N) 群的不变张量.

如果杨表有 N 行, 则在那些包含 N 行的列中, 正则张量杨表的填数只有一种填法, 就是自上而下顺序填入 $1 \sim N$ 这 N 个数. 因此 N 行杨图描写的张量子空间中, 不同的正则张量杨表数目完全由余下的格子填数方法决定, 即下面两杨图对应的表示维数相同

$$\begin{aligned}
&[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_{N-1}, \lambda_N] \\
\text{和}\quad &[(\lambda_1 - \lambda_N), (\lambda_2 - \lambda_N), \cdots, (\lambda_{N-1} - \lambda_N), 0]
\end{aligned} \tag{8.37}$$

以后会证明这两个表示是等价的. 通过下面例子就能了解, 从钩形规则来看, 为什么这两表示维数相同

$$d_{[4,3,2,2]}(\mathrm{SU}(4)) = \frac{\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 4 & 5 & 6 & 7 \\ \hline 3 & 4 & 5 & \\ \cline{1-3} 2 & 3 & & \\ \cline{1-2} 1 & 2 & & \\ \cline{1-2}\end{array}}{\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 7 & 6 & 3 & 1 \\ \hline 5 & 4 & 1 & \\ \cline{1-3} 3 & 2 & & \\ \cline{1-2} 2 & 1 & & \\ \cline{1-2}\end{array}} = d_{[2,1]}(\mathrm{SU}(4)) = \frac{\begin{array}{|c|c|}\hline 4 & 5 \\ \hline 3 & \\ \cline{1-1}\end{array}}{\begin{array}{|c|c|}\hline 3 & 1 \\ \hline 1 & \\ \cline{1-1}\end{array}}$$

按公式 (8.32), SU(2) 群一行的杨图 $[n]$ 对应表示的维数为 $n+1$. 与第四章给出的不可约表示 D^j 相比, $n = 2j$

$$[2j] \simeq D^j , \qquad d_{[n]}(\mathrm{SU}(2)) = n+1$$

SU(3) 群两行的杨图 $[\mu,\nu]$ 对应表示的维数为

$$d_{[\mu,\nu]}(\mathrm{SU}(3)) = \frac{\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|}\hline 3 & 4 & \cdots & \nu+2 & \nu+3 & \cdots & \mu+2 \\ \hline 2 & 3 & \cdots & \nu+1 \\ \cline{1-4}\end{array}}{\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|}\hline \mu+1 & \mu & \cdots & \mu-\nu+2 & \mu-\nu & \cdots & 1 \\ \hline \nu & \nu-1 & \cdots & 1 \\ \cline{1-4}\end{array}} = \frac{1}{2}(\mu+2)(\nu+1)(\mu-\nu+1) \tag{8.38}$$

例如

$$d_{[1]}(\mathrm{SU}(3)) = d_{[1,1]}(\mathrm{SU}(3)) = 3 , \qquad d_{[2,1]}(\mathrm{SU}(3)) = 8,$$

$$d_{[3]}(\mathrm{SU}(3)) = d_{[3,3]}(\mathrm{SU}(3)) = 10 , \qquad d_{[4,2]}(\mathrm{SU}(3)) = 27$$

六、SU(N) 群不可约表示按子群链分解

SU(N) 群的元素 u 是 N 维复空间的一个幺正变换. 如果限制在前 M 维子空间做幺正变换, 就得到子群 SU(M). 把 SU(N) 群的张量中取值大于 M 的分量指标固定, 就变成 SU(M) 群的张量. 把 N 的取值逐步限制, 就得到 SU(N) 群的一个子群链

$$\mathrm{SU}(N) \supset \mathrm{SU}(N-1) \supset \cdots \supset \mathrm{SU}(3) \supset \mathrm{SU}(2) \tag{8.39}$$

我们特别关心群链中相邻群的关系. 张量基用杨算符 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}$ 投影后, 得到属 SU(N) 群不可约表示 $[\lambda]$ 的正则张量杨表. 这正则张量杨表中, 数 N 只能填在表中各列的最下格, 将填 N 的格子移去, 就得到 SU($N-1$) 群不可约表示 $[\mu]$ 的正则张量杨表. 例如

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|}\hline & & & N & N \\ \hline & \\ \cline{1-2} & N \\ \cline{1-2} N \\ \cline{1-1}\end{array} \qquad \begin{array}{l}[\lambda] = [5,2,2,1] \\ [\mu] = [3,2,1]\end{array}$$

由不同的正则张量杨表移去填 N 的格子后得到的杨图 $[\mu]$ 可能不同. 把属于 SU(N) 群同一个不可约表示的所有正则张量杨表, 分别移去填 N 的格子, 可能得到若干种杨图, 其中属于杨图 $[\mu]$ 的所有正则张量杨表, 正好构成 SU($N-1$) 群不可约表示 $[\mu]$ 的完备基. 这正是 SU(N) 群不可约表示 $[\lambda]$ 按 SU($N-1$) 群不可约表示 $[\mu]$ 分解的方法, 其中 $[\lambda]$ 和 $[\mu]$ 的分量满足如下关系

$$
\begin{aligned}
&[\lambda] \longrightarrow \bigoplus [\mu] , \qquad d_{[\lambda]}(\mathrm{SU}(N)) = \sum_{[\mu]} d_{[\mu]}(\mathrm{SU}(N-1)), \\
&\lambda_N \leqslant \mu_{N-1} \leqslant \lambda_{N-1} \leqslant \mu_{N-2} \leqslant \cdots \leqslant \mu_2 \leqslant \lambda_2 \leqslant \mu_1 \leqslant \lambda_1
\end{aligned}
\tag{8.40}
$$

这方法可以继续进行下去, 把 SU(N) 群不可约表示 $[\lambda]$, 分解为群链式 (8.39) 中每一个子群 SU(M) 的不可约表示的直和, 而正则张量杨表中移去填数大于 M 的格子后, 正是子群 SU(M) 某一不可约表示的基. 这方法原则上提供了一个计算 SU(N) 群不可约表示维数的方法, 但仅就计算表示维数而言, 这方法并不实用. 在需要 SU(N) 群表示按子群链表示分解的问题中, 才用到这方法.

8.2　正交归一的不可约张量基

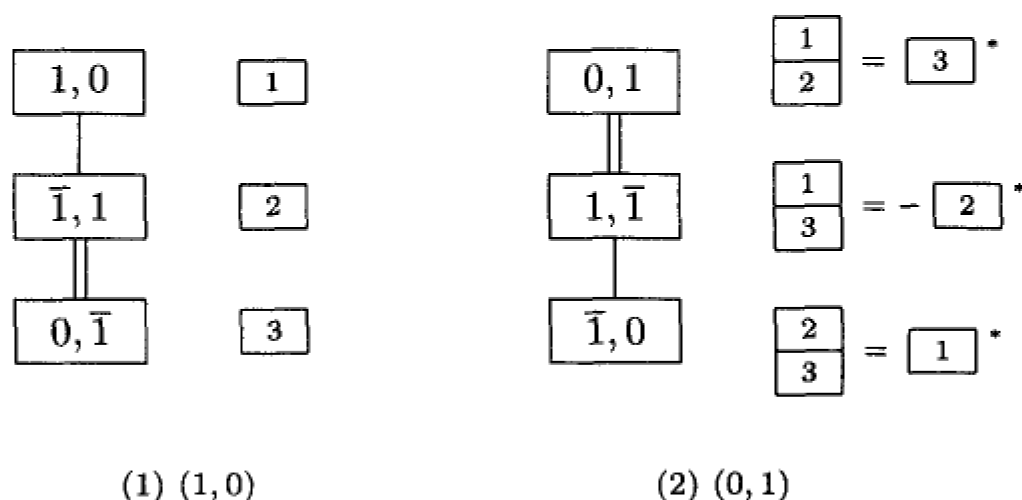
SU(N) 群的张量表示是自身表示的直乘, 因而是幺正的. 可定义内积, 使原来的张量基 $\boldsymbol{\Theta}_{a_1\cdots a_N}$ 是正交归一的. 正则张量杨表是张量基 $\boldsymbol{\Theta}_{a_1\cdots a_N}$ 的线性组合, 它们构成张量子空间 $\mathcal{T}_{\mu}^{[\lambda]}$ 的一组完备基, 但这组基一般既不正交也不归一. 以 SU(3) 群张量子空间 $\mathcal{T}_1^{[2,1]}$ 为例, 式 (8.24) 给出此子空间正则张量杨表的一般形式. $\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\boldsymbol{\Theta}_{112}$ 归一化到 6, 而 $\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\boldsymbol{\Theta}_{123}$ 归一化到 4. $\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\boldsymbol{\Theta}_{123}$ 和 $\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\boldsymbol{\Theta}_{132}$ 不正交. 在这样的张量基中计算得的表示不会是幺正表示. 我们希望把它们做适当的组合, 也就是做相似变换, 使新的基与第七章用方块权图方法计算的基一一对应起来, 从而使表示变成幺正的.

从表示的幺正化来说, 重要的是表示空间的基正交和归一到相同的常数, 而不在乎是否归一到数 1. 由于最高权一定是单权, 最高权态一定与其他状态正交, 通常就让正则张量杨表组合后, 都归一化到与最高权态一样. 从最高权态出发, 按照方块权图, 用降算符作用, 就可以得到正交归一的其他权态. 下面通过 SU(3) 群的例子来说明正交归一张量基的计算方法.

盖尔范德 (Gelfand) 提出一种统一的方法, 标记 SU(N) 群不可约表示 $[\lambda]$ 的正交归一的状态基, 称为盖尔范德基. 他规定在出现重权时先按 $\mathcal{A}_1$ 子代数的多重态来区分, 如再有重权, 按 $\mathcal{A}_2$ 子代数的多重态来区分, 依此类推. 在此条件下, 他解析地推导出生成元 (谢瓦莱基) 在这组基里的表示矩阵元. 详细请参看附录 32.

一、SU(3)群基本表示

图 7.3 (a) 和 (b) 给出 SU(3) 群两个基本表示 $(1,0)$ 和 $(0,1)$ 的方块权图. 由式 (8.30), 这两个表示对应的杨图分别为 $[1,0]$ 和 $[1,1]$, 最高权态的正则张量杨表分别为 $\boxed{1}$ 和 $\begin{array}{|c|}\hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline\end{array}$. 按式 (8.28), 用降算符作用后就可以得到两表示各状态所对应的正则张量杨表. 因为这两个表示互为复共轭表示, 它们的状态基可由式 (7.160) 相联系. 这些都列于图 8.1.



(1) (1,0) (2) (0,1)

图 8.1 SU(3) 群基本表示的方块权图和张量基

二、SU(3)群三阶对称张量表示

SU(3) 群三阶对称张量表示的杨图是 $[\lambda]=[3,0]$, 最高权是 $\boldsymbol{M}=(3,0)$. 有三种典型的正则张量杨表, 它们分别归一到 36, 12 和 6

$$\begin{aligned}
&\begin{array}{|c|c|c|}\hline a & a & a\\\hline\end{array}=6\left\{\Theta_{aaa}\right\},\\
&\begin{array}{|c|c|c|}\hline a & b & b\\\hline\end{array}=2\sqrt{3}\left\{3^{-1/2}\left(\Theta_{abb}+\Theta_{bab}+\Theta_{bba}\right)\right\},\\
&\begin{array}{|c|c|c|}\hline a & b & c\\\hline\end{array}=\sqrt{6}\left\{6^{-1/2}\left(\Theta_{abc}+\Theta_{acb}+\Theta_{bac}+\Theta_{bca}+\Theta_{cab}+\Theta_{cba}\right)\right\}
\end{aligned} \tag{8.41}$$

其中, a, b 和 c 互不相同. 每一组填数都只有一个正则张量杨表, 因而对称张量表示不存在重权. 最高权态为

$$|(3,0),(3,0)\rangle=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 1 & 1\\\hline\end{array}$$

在降算符 F_μ 作用时, 应计算所有产生的张量杨表, 并用类似式 (8.23) 的关系把它们化为正则张量杨表, 例如

$$\begin{aligned}
&F_1\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 1 & 1\\\hline\end{array}=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 1 & 2\\\hline\end{array}+\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 1\\\hline\end{array}+\begin{array}{|c|c|c|}\hline 2 & 1 & 1\\\hline\end{array}=3\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 1 & 2\\\hline\end{array},\\
&F_1\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 1 & 3\\\hline\end{array}=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 3\\\hline\end{array}+\begin{array}{|c|c|c|}\hline 2 & 1 & 3\\\hline\end{array}=2\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 3\\\hline\end{array}
\end{aligned} \tag{8.42}$$

方块权图和各状态基所对应的正交归一的张量基画在图 8.2 中.

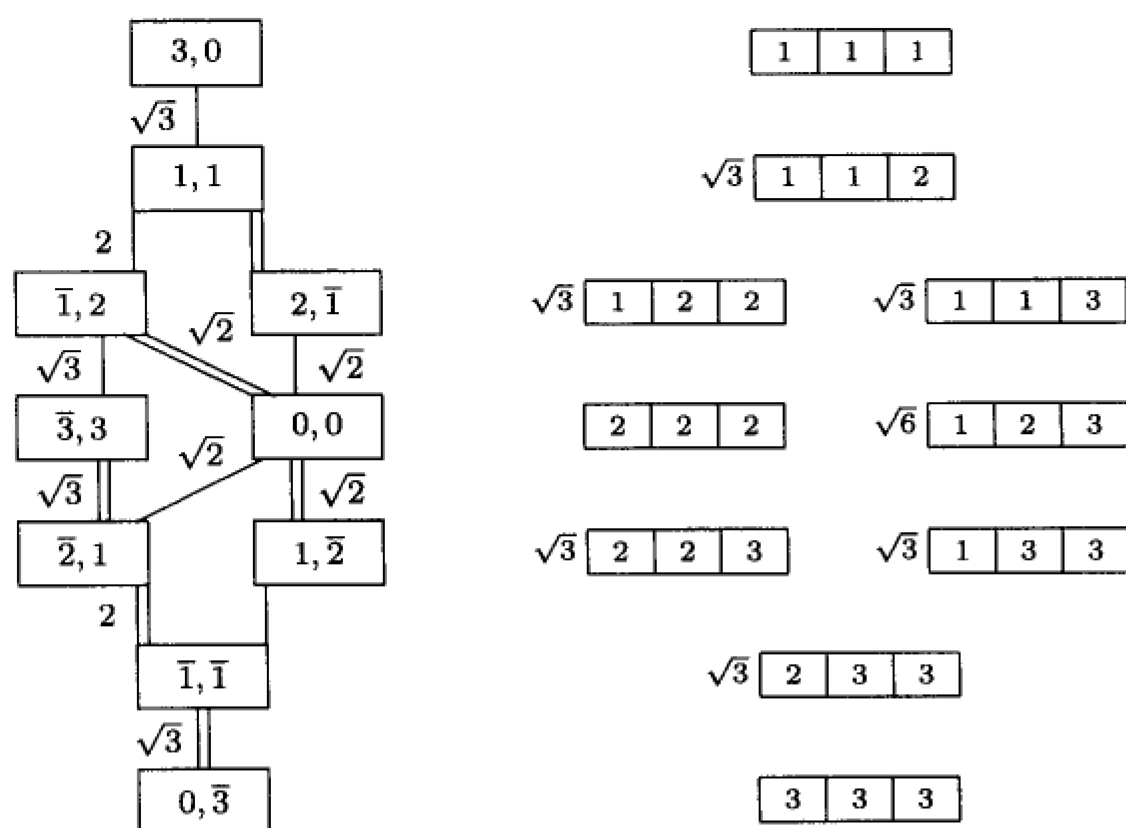


图 8.2　SU(3) 群对称张量表示 [3,0] 的方块权图和张量基

我们只举几个例子来说明计算过程

$$|(3,0),(1,1)\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}\, F_1\, |(3,0),(3,0)\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}\, F_1 \boxed{1\ |\ 1\ |\ 1} = \sqrt{3} \boxed{1\ |\ 1\ |\ 2},$$

$$|(3,0),(0,0)\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\, F_1\, |(3,0),(2,\overline{1})\rangle = \sqrt{\frac{3}{2}}\, F_1 \boxed{1\ |\ 1\ |\ 3} = \sqrt{6} \boxed{1\ |\ 2\ |\ 3}$$

表示 (3,0) 的复共轭表示是 (0,3), 对应杨图 [3,3]. 取杨算符 $\mathcal{Y}_1^{[3,3]}$, 它的杨表和展开式为

1	2	3
4	5	6

$$\begin{aligned}\mathcal{Y}_1^{[3,3]} &= [E + (1\ 2) + (1\ 3) + (2\ 3) + (1\ 2\ 3) + (1\ 3\ 2)] \\ &\quad \times\ [E + (4\ 5) + (4\ 6) + (5\ 6) + (4\ 5\ 6) + (4\ 6\ 5)] \\ &\quad \times\ [E - (1\ 4)]\,[E - (2\ 5)]\,[E - (3\ 6)]\end{aligned}$$

有三种典型的正则张量杨表, 分别归一到 $2880 = 864 \times 6$, $1728 = 864 \times 2$ 和 864

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 1 & 1 \\ \hline 2 & 2 & 2 \\ \hline\end{array} = \mathcal{Y}_1^{[3,3]}\Theta_{111222} = 36\Theta_{111222} - 36\Theta_{222111} - 12\,[\Theta_{112221} + \Theta_{121221} + \Theta_{211221}$$

$$+\Theta_{112212}+\Theta_{121212}+\Theta_{211212}+\Theta_{112122}+\Theta_{121122}+\Theta_{211122}]+12\,[\Theta_{221112}$$
$$+\Theta_{221121}+\Theta_{221211}+\Theta_{212112}+\Theta_{212121}+\Theta_{212211}+\Theta_{122112}+\Theta_{122121}+\Theta_{122211}],$$

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&1&1\\\hline 2&2&3\\\hline\end{array}=\mathcal{Y}_1^{[3,3]}\Theta_{111223}=12\,[\Theta_{111223}+\Theta_{111232}+\Theta_{111322}]-12\,[\Theta_{223111}+\Theta_{232111}$$
$$+\Theta_{322111}]-4\,[\Theta_{113221}+\Theta_{131221}+\Theta_{311221}+\Theta_{113212}+\Theta_{131212}+\Theta_{311212}$$
$$+\Theta_{113122}+\Theta_{131122}+\Theta_{311122}]+4\,[\Theta_{221113}+\Theta_{221131}+\Theta_{221311}+\Theta_{212113}$$
$$+\Theta_{212131}+\Theta_{212311}+\Theta_{122113}+\Theta_{122131}+\Theta_{122311}]-4\,[\Theta_{121213}+\Theta_{121231}$$
$$+\Theta_{121123}+\Theta_{121132}+\Theta_{121312}+\Theta_{121321}+\Theta_{112213}+\Theta_{112231}+\Theta_{112123}$$
$$+\Theta_{112132}+\Theta_{112312}+\Theta_{112321}+\Theta_{211213}+\Theta_{211231}+\Theta_{211123}+\Theta_{211132}$$
$$+\Theta_{211312}+\Theta_{211321}]+4\,[\Theta_{123211}+\Theta_{132211}+\Theta_{231211}+\Theta_{213211}$$
$$+\Theta_{312211}+\Theta_{321211}+\Theta_{123121}+\Theta_{132121}+\Theta_{231121}+\Theta_{213121}+\Theta_{312121}$$
$$+\Theta_{321121}+\Theta_{123112}+\Theta_{132112}+\Theta_{231112}+\Theta_{213112}+\Theta_{312112}+\Theta_{321112}],$$

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&1&2\\\hline 2&3&3\\\hline\end{array}=\mathcal{Y}_1^{[3,3]}\Theta_{112233}=4\,[\Theta_{112233}+\Theta_{112323}+\Theta_{112332}+\Theta_{121233}+\Theta_{121323}$$
$$+\Theta_{121332}+\Theta_{211233}+\Theta_{211323}+\Theta_{211332}]-4\,[\Theta_{233112}+\Theta_{323112}+\Theta_{332112}$$
$$+\Theta_{233121}+\Theta_{323121}+\Theta_{332121}+\Theta_{233211}+\Theta_{323211}+\Theta_{332211}]-4\,[\Theta_{113232}$$
$$+\Theta_{131232}+\Theta_{311232}+\Theta_{113322}+\Theta_{131322}+\Theta_{311322}+\Theta_{113223}+\Theta_{131223}+\Theta_{311223}]$$
$$+4\,[\Theta_{232113}+\Theta_{232131}+\Theta_{232311}+\Theta_{322113}+\Theta_{322131}+\Theta_{322311}+\Theta_{223113}$$
$$+\Theta_{223131}+\Theta_{223311}]-4\,[\Theta_{212133}+\Theta_{122133}+\Theta_{221133}+\Theta_{212313}+\Theta_{122313}$$
$$+\Theta_{221313}+\Theta_{212331}+\Theta_{122331}+\Theta_{221331}]+4\,[\Theta_{133212}+\Theta_{133122}+\Theta_{133221}$$
$$+\Theta_{313212}+\Theta_{313122}+\Theta_{313221}+\Theta_{331212}+\Theta_{331122}+\Theta_{331221}]$$

其中, 第一式是最高权态. 降算符 F_μ 作用时应计算所有产生的张量杨表, 例如有

$$F_2\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&1&1\\\hline 2&2&2\\\hline\end{array}=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&1&1\\\hline 2&2&3\\\hline\end{array}+\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&1&1\\\hline 2&3&2\\\hline\end{array}+\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&1&1\\\hline 3&2&2\\\hline\end{array}=3\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&1&1\\\hline 2&2&3\\\hline\end{array},$$

$$F_2\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&1&2\\\hline 2&2&3\\\hline\end{array}=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&1&2\\\hline 2&3&3\\\hline\end{array}+\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&1&2\\\hline 3&2&3\\\hline\end{array}=2\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&1&2\\\hline 2&3&3\\\hline\end{array}$$

方块权图和各状态基所对应的正交归一的张量基画在图 8.3 中. 当用式 (7.160) 化为复共轭的张量基时, 略去了由于归一化而产生的常数因子 12.

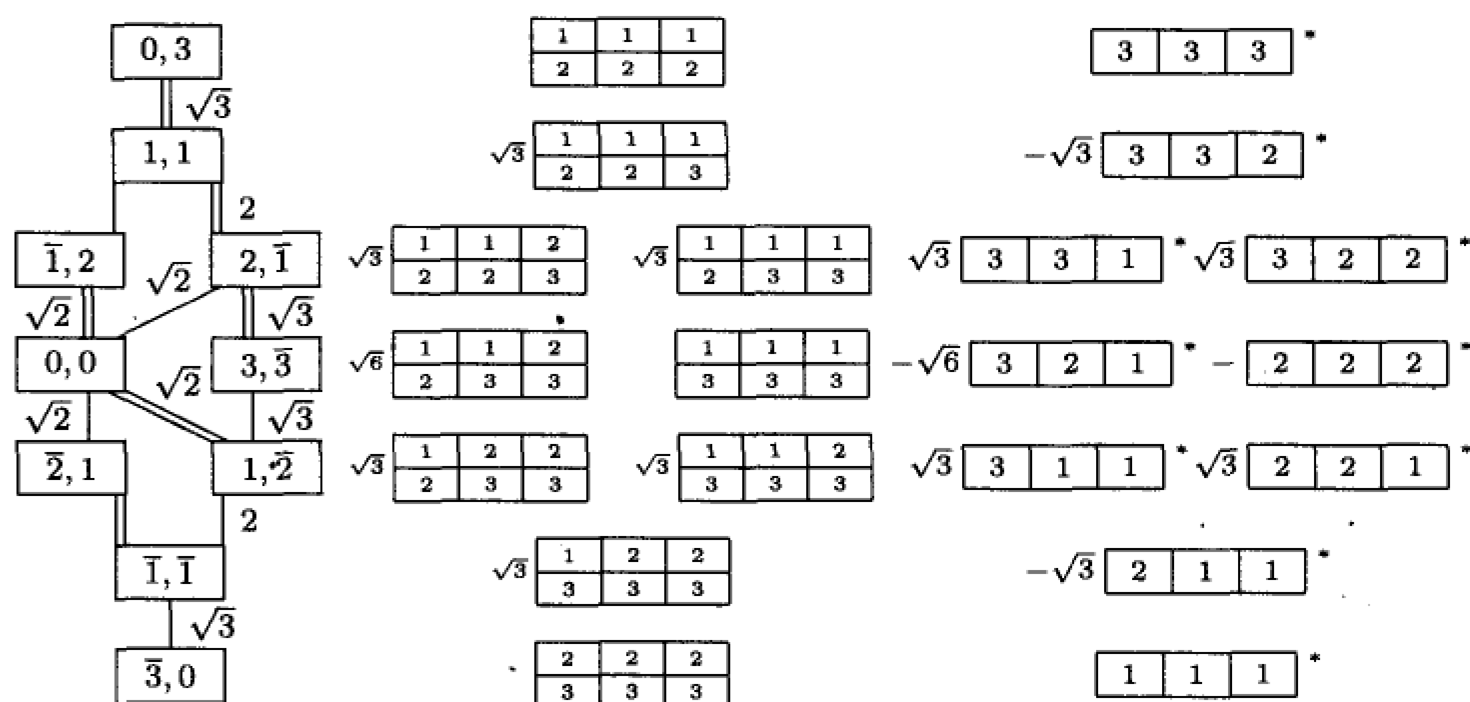


图 8.3　SU(3) 群对称张量表示 [3, 3] 的方块权图和张量基.

三、SU(3)群三阶混合对称张量表示

SU(3) 群三阶混合对称张量表示的杨图是 $[\lambda]=[2,1]$, 最高权是 $\boldsymbol{M}=(1,1)$, 它也是 SU(3) 群的伴随表示. 表示 [2, 1] 是八维表示, 张量杨表的一般展开式由式 (8.24) 给出, 在那里也计算了全部八个正则张量杨表的展开式. 式 (8.29) 又给出了降算符对这些正则张量杨表的计算公式. 在把正则张量杨表正交和归一化时, 先计算两种典型的正则张量杨表. 若取杨算符 $\mathcal{Y}_1^{[2,1]}$, 有

$$\text{杨表}\mathcal{Y}_1^{[2,1]}:\ \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\ \hline 3&\multicolumn{1}{c}{}\\ \cline{1-1}\end{array}\,,\qquad \begin{aligned}&\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\ \hline 2&\multicolumn{1}{c}{}\\ \cline{1-1}\end{array}=2\boldsymbol{\Theta}_{112}-\boldsymbol{\Theta}_{211}-\boldsymbol{\Theta}_{121}\,,\\ &\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\ \hline 3&\multicolumn{1}{c}{}\\ \cline{1-1}\end{array}=\boldsymbol{\Theta}_{123}-\boldsymbol{\Theta}_{321}+\boldsymbol{\Theta}_{213}-\boldsymbol{\Theta}_{231}\end{aligned}\tag{8.43}$$

它们分别归一到 6 和 4. 其次, 注意重权态的计算

$$\begin{aligned}|(1,1),(0,0)_1\rangle&=\sqrt{\frac{1}{2}}\,F_1\,|(1,1),(2,\overline{1})\rangle=\sqrt{\frac{1}{2}}\,F_1\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\ \hline 3&\multicolumn{1}{c}{}\\ \cline{1-1}\end{array}\\
&=\sqrt{\frac{1}{2}}\left\{\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\ \hline 3&\multicolumn{1}{c}{}\\ \cline{1-1}\end{array}+\begin{array}{|c|c|}\hline 2&1\\ \hline 3&\multicolumn{1}{c}{}\\ \cline{1-1}\end{array}\right\}=\sqrt{2}\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\ \hline 3&\multicolumn{1}{c}{}\\ \cline{1-1}\end{array}-\sqrt{\frac{1}{2}}\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\ \hline 2&\multicolumn{1}{c}{}\\ \cline{1-1}\end{array}\,,\\
|(1,1),(0,0)_2\rangle&=\sqrt{\frac{2}{3}}\left\{F_2\,|(1,1),(\overline{1},2)\rangle-\sqrt{\frac{1}{2}}\,|(1,1),(0,0)_1\rangle\right\}\\
&=\sqrt{\frac{2}{3}}\left\{F_2\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\ \hline 2&\multicolumn{1}{c}{}\\ \cline{1-1}\end{array}-\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\ \hline 3&\multicolumn{1}{c}{}\\ \cline{1-1}\end{array}+\frac{1}{2}\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\ \hline 2&\multicolumn{1}{c}{}\\ \cline{1-1}\end{array}\right\}=\sqrt{\frac{3}{2}}\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\ \hline 2&\multicolumn{1}{c}{}\\ \cline{1-1}\end{array}\end{aligned}\tag{8.44}$$

伴随表示的方块权图和各状态基所对应的正交归一的张量基画在图 8.4 中.

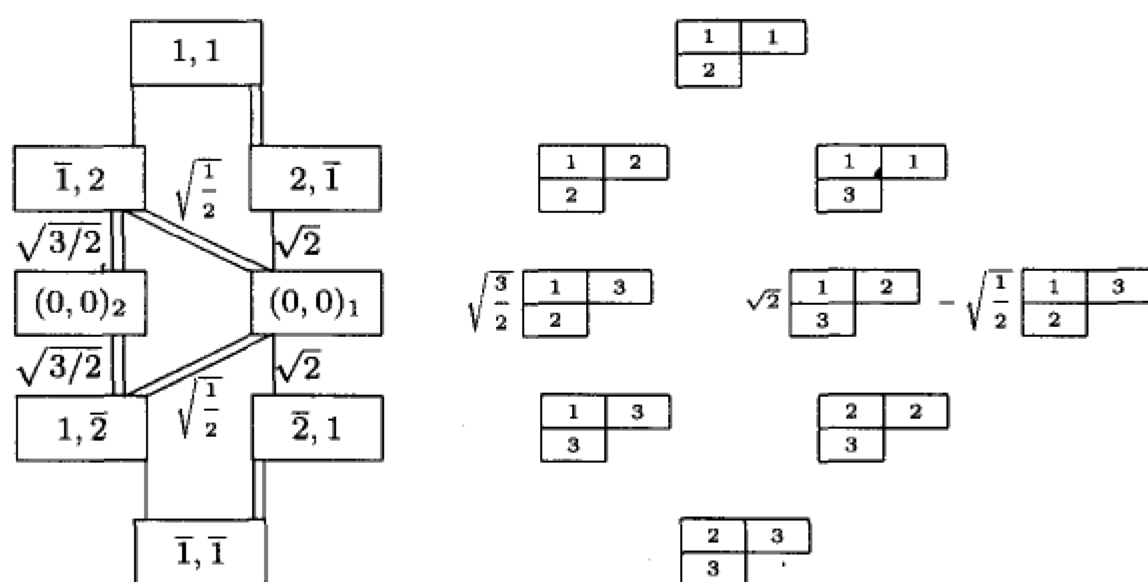


图 8.4 SU(3) 群伴随表示的方块权图和张量基

8.3 张量表示的直乘分解

本节用张量外积的概念讨论 SU(N) 群两个不可约表示的直乘分解问题, 也就是计算 SU(N) 群的克莱布施 – 戈登级数, 并由此深入研究协变张量和逆变张量的两类不可约张量基之间的联系.

一、张量的外积

设 $\boldsymbol{T}^{(1)}_{a_1\cdots a_n}$ 和 $\boldsymbol{T}^{(2)}_{b_1\cdots b_m}$ 分别是 SU(N) 群的 n 阶和 m 阶张量, 把它们并在一起就构成 SU(N) 群的一个 $n+m$ 阶张量, 称为两张量的外积. 两张量取外积后, 张量的阶数相加. 由张量外积 $\boldsymbol{T}^{(1)}_{a_1\cdots a_n}\boldsymbol{T}^{(2)}_{b_1\cdots b_m}$ 构成的张量空间记作 $\mathcal{T}$.

设参与外积的两张量分别用杨算符投影, 得到的张量子空间分别对应 SU(N) 群的不可约表示 $[\lambda]$ 和 $[\mu]$. 两张量子空间的直积记作 $\mathcal{T}^{[\lambda][\mu]}$

$$\mathcal{Y}^{[\lambda]}\boldsymbol{T}^{(1)}\mathcal{Y}^{[\mu]}\boldsymbol{T}^{(2)} = \mathcal{Y}^{[\lambda]}\mathcal{Y}^{[\mu]}\boldsymbol{T}^{(1)}\boldsymbol{T}^{(2)} \in \mathcal{Y}^{[\lambda]}\mathcal{Y}^{[\mu]}\mathcal{T} = \mathcal{T}^{[\lambda][\mu]} \tag{8.45}$$

其中, 杨图 $[\lambda]$ 和 $[\mu]$ 分别是 n 和 m 格的, 行数都不大于 N. 这里为符号简洁起见略去正则杨算符的序指标.

投影后的张量子空间 $\mathcal{T}^{[\lambda][\mu]}$, 维数是 $d_{[\lambda]}(\text{SU}(N))d_{[\mu]}(\text{SU}(N))$, 它仍对 SU($N$) 变换保持不变, 对应的表示是 SU($N$) 群两不可约表示的直乘 $[\lambda]\times[\mu]$, 它一般是 SU(N) 群的可约表示. 另一方面, 张量 $\boldsymbol{T}^{(1)}\boldsymbol{T}^{(2)}$ 外积的集合构成 $n+m$ 阶张量空间 $\mathcal{T}$. 取格数为 $n+m$ 和行数不大于 N 的杨图 $[\omega]$, 用杨算符 $\mathcal{Y}^{[\omega]}$ 对 $\mathcal{T}$ 投影, 得到对

应 SU(N) 群不可约表示 $[\omega]$ 的张量子空间

$$\mathcal{Y}^{[\omega]}\boldsymbol{T}^{(1)}\boldsymbol{T}^{(2)} \in \mathcal{Y}^{[\omega]}\mathcal{T} = \mathcal{T}^{[\omega]} \tag{8.46}$$

若

$$\mathcal{Y}^{[\lambda]}\mathcal{Y}^{[\mu]}t_\alpha\mathcal{Y}^{[\omega]} \neq 0 \tag{8.47}$$

其中, t_α 是置换群 S_{n+m} 群代数中的矢量, 则在张量子空间 $\mathcal{T}^{[\lambda][\mu]}$ 中, 包含有对应表示 $[\omega]$ 的张量子空间

$$\mathcal{Y}^{[\lambda]}\mathcal{Y}^{[\mu]}\left\{t_\alpha\mathcal{Y}^{[\omega]}\boldsymbol{T}^{(1)}\boldsymbol{T}^{(2)}\right\} \in \mathcal{Y}^{[\lambda]}\mathcal{Y}^{[\mu]}\mathcal{T} = \mathcal{T}^{[\lambda][\mu]} \tag{8.48}$$

最左面的杨算符决定了投影后的张量属张量子空间 $\mathcal{T}^{[\lambda][\mu]}$, 因为花括号中的量总属于整个张量空间 $\mathcal{T}$. 另一方面, 虽然在杨算符 $\mathcal{Y}^{[\omega]}$ 的左面乘了置换的线性组合, 使这子空间 $\mathcal{Y}^{[\omega]}\mathcal{T} = \mathcal{T}^{[\omega]}$ 发生了变动, 但由于外尔互反性, 这种变动是由置换变换造成的空间整体的变动, 它并不影响属此空间的张量在 SU(N) 变换中的变换性质. 只要这空间不是零空间, 最右面的杨算符决定了这个更小的张量子空间在 SU(N) 变换中的变换性质, 即对应 SU(N) 群的表示 $[\omega]$. 最右面的杨算符决定子空间张量的变换性质, 最左面杨算符决定子空间的所属.

式 (8.48) 表明, 只要式 (8.47) 不为零, 在 SU(N) 群不可约表示直乘 $[\lambda]\times[\mu]$ 的约化中, 就包含表示 $[\omega]$, 因而在直乘表示约化中出现的表示及其重数可由立特武德 – 理查森规则计算

$$[\lambda]\times[\mu] \simeq \bigoplus_{[\omega]} a^{\omega}_{\lambda\mu}[\omega] \tag{8.49}$$

与第六章中介绍的计算置换群表示外积约化的立特武德 – 理查森规则比较, 有重要的不同, 主要是这里牵涉的表示是 SU(N) 群的表示, 不是置换群的表示. 正因为它们是 SU(N) 群的表示, 引导出计算公式有两点不同. 一是表示约化的维数公式 [请与式 (6.145) 比较] 为

$$d_{[\lambda]}(\mathrm{SU}(N))d_{[\mu]}(\mathrm{SU}(N)) = \sum_{[\omega]} a^{\omega}_{\lambda\mu}d_{[\omega]}(\mathrm{SU}(N)) \tag{8.50}$$

二是按立特武德 – 理查森规则计算出的杨图 $[\omega]$, 若它的行数大于 N 对应零空间, 应把它从克莱布施 – 戈登级数中删去. 例如, SU(3) 群两表示 $[2,1]$ 的直乘分解, 与

6.6 节的例 1 相比, 删去了两个零维表示

$$\ytableaushort{{}{},{}} \times \ytableaushort{11,2} \simeq \ytableaushort{{}{}11,{}2} \oplus \ytableaushort{{}{}11,{},2}$$

$$\oplus \ytableaushort{{}{}1,{}12} \oplus \ytableaushort{{}{}1,{}1,2} \oplus \ytableaushort{{}{}1,{}2,1} \oplus \ytableaushort{{}{},{}1,12}$$

它们的维数公式是

$$8 \times 8 = 27 + 10 + 10^{*} + 2 \times 8 + 1 \tag{8.51}$$

这里, 加星号的数 10^*, 说明表示 $[3,3]$ 等价于表示 $[3,0]$ 的复共轭表示.

一个重要的特例是 N 阶完全反对称张量表示 $[1^N]$ 与任意表示 $[\lambda]$ 的直乘. 当按立特武德 - 理查森规则计算克莱布施 - 戈登级数时, 只有一个表示的杨图行数不大于 N, 它就是把两个杨图简单地粘起来

$$[1^N] \times [\lambda] \simeq [\lambda'] , \qquad \lambda'_j = \lambda_j + 1 \tag{8.52}$$

即杨图 $[\lambda']$ 比起原杨图 $[\lambda]$ 来, 左面多了一列 N 行的格子. 我们已经证明, N 阶完全反对称张量表示 $[1^N]$ 等价于恒等表示, 因此表示 $[\lambda']$ 和表示 $[\lambda]$ 等价, 即 N 行的杨图和去掉左边填满 N 行的那些列后的杨图, 对应的表示是等价的. 从正则张量杨表的角度看, 这些列中数字只有唯一的一种填法, 就是从上而下顺序由 1 填到 N. 去掉或不去掉那些列, 不影响独立的正则张量杨表个数, 从而两表示的维数是一样的. 这样, SU(N) 群的不可约表示可用行数小于 N 的杨图来描写.

立特武德 - 理查森规则给出了 SU(N) 群两个用杨图标记的不可约表示直乘分解的克莱布施 - 戈登级数, 而级数中出现的每一个不可约表示的最高权态展开式, 则需要用升算符作用为零的条件 (7.123) 来计算. 用正则张量杨表表达时, 各展开项的相对系数比较容易计算, 但归一化系数算起来有些麻烦, 好在最高权态的归一化不重要. 下面以 SU(3) 群两表示 $[2,1]$ 的直乘分解为例, 列出用正则张量杨表表达的各表示最高权态展开式, 并与第七章用主权图方法的计算结果做对比.

$$\ytableaushort{1111,22} \sim \ytableaushort{11,2} \times \ytableaushort{11,2}$$

$$\| (2,2),(2,2)\rangle = |1,1\rangle \ |1,1\rangle$$

$$\ytableaushort{1111,2,3} \sim \ytableaushort{11,2} \times \ytableaushort{11,3} - \ytableaushort{11,3} \times \ytableaushort{11,2}$$

$$||(3,0),(3,0)\rangle = \sqrt{1/2}\ \{\ |1,1\rangle\ |2,\bar{1}\rangle - |2,\bar{1}\rangle\ |1,1\rangle\ \}$$

$$\begin{array}{ccc}1&1&1\\2&2&2\end{array} \sim \begin{array}{cc}1&1\\2&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&2\\2&\end{array} - \begin{array}{cc}1&2\\2&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&1\\2&\end{array}$$

$$||(0,3),(0,3)\rangle = \sqrt{1/2}\{\ |1,1\rangle\ |\bar{1},2\rangle - |\bar{1},2\rangle\ |1,1\rangle\ \}$$

$$\begin{array}{ccc}1&1&1\\2&2&\\3&&\end{array}\ \mathrm{S} \sim \begin{array}{cc}1&1\\2&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&2\\3&\end{array} - \begin{array}{cc}1&2\\2&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&1\\3&\end{array}$$

$$- \begin{array}{cc}1&1\\3&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&2\\2&\end{array} + \begin{array}{cc}1&2\\3&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&1\\2&\end{array}$$

$$||(1,1),(1,1)\rangle_S = \sqrt{1/20}\ \{\sqrt{3}\ |1,1\rangle\ |(0,0)_1\rangle + |1,1\rangle\ |(0,0)_2\rangle - \sqrt{6}\ |\bar{1},2\rangle\ |2,\bar{1}\rangle$$

$$-\sqrt{6}\ |2,\bar{1}\rangle\ |\bar{1},2\rangle + |(0,0)_2\rangle\ |1,1\rangle + \sqrt{3}\ |(0,0)_1\rangle\ |1,1\rangle\}$$

$$\begin{array}{ccc}1&1&1\\2&2&\\3&&\end{array}\ \mathrm{A} \sim \begin{array}{cc}1&1\\2&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&2\\3&\end{array} - 2\begin{array}{cc}1&1\\2&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&3\\2&\end{array} - \begin{array}{cc}1&2\\2&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&1\\3&\end{array}$$

$$+ \begin{array}{cc}1&1\\3&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&2\\2&\end{array} + 2\begin{array}{cc}1&3\\2&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&1\\2&\end{array} - \begin{array}{cc}1&2\\3&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&1\\2&\end{array}$$

$$||(1,1),(1,1)\rangle_A = \sqrt{1/12}\ \{|1,1\rangle\ |(0,0)_1\rangle - \sqrt{3}\ |1,1\rangle\ |(0,0)_2\rangle - \sqrt{2}\ |\bar{1},2\rangle\ |2,\bar{1}\rangle$$

$$+\sqrt{2}\ |2,\bar{1}\rangle\ |\bar{1},2\rangle + \sqrt{3}\ |(0,0)_2\rangle\ |1,1\rangle - |(0,0)_1\rangle\ |1,1\rangle\}$$

$$\begin{array}{cc}1&1\\2&2\\3&3\end{array} \sim \begin{array}{cc}1&1\\2&\end{array}\times\begin{array}{cc}2&3\\3&\end{array} - \begin{array}{cc}1&1\\3&\end{array}\times\begin{array}{cc}2&2\\3&\end{array} - \begin{array}{cc}1&2\\2&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&3\\3&\end{array}$$

$$- \begin{array}{cc}1&2\\3&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&3\\2&\end{array} - \begin{array}{cc}1&3\\2&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&2\\3&\end{array} - \begin{array}{cc}1&3\\3&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&2\\2&\end{array}$$

$$- \begin{array}{cc}2&2\\3&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&1\\3&\end{array} + \begin{array}{cc}2&3\\3&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&1\\2&\end{array}$$

$$+2\begin{array}{cc}1&2\\3&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&2\\3&\end{array} + 2\begin{array}{cc}1&3\\2&\end{array}\times\begin{array}{cc}1&3\\2&\end{array}$$

$$||(0,0),(0,0)\rangle = \sqrt{1/8}\ \{|1,1\rangle\ |\bar{1},\bar{1}\rangle - |2,\bar{1}\rangle\ |\bar{2},1\rangle - |\bar{1},2\rangle\ |1,\bar{2}\rangle + |(0,0)_1\rangle\ |(0,0)_1\rangle$$

$$+|(0,0)_2\rangle\ |(0,0)_2\rangle - |1,\bar{2}\rangle\ |\bar{1},2\rangle - |\bar{2},1\rangle\ |2,\bar{1}\rangle + |\bar{1},\bar{1}\rangle\ |1,1\rangle\}$$

二、协变张量和逆变张量

设 $D(G)$ 是群 G 的表示, 则 $D(G)^*$ 和 $\left(D(G)^{-1}\right)^T$ 也是群 G 的表示. 若 $D(G)$ 是幺正表示, 则后两个表示相同. SU(N) 群的自身表示就是这种情况, $u^* = \left(u^{-1}\right)^T$. 但 SU($N$) 群自身表示与其复共轭表示不等价. 按自身表示的复共轭表示变换的矢量称为逆变矢量, 按复共轭表示的直乘表示变换的张量称为逆变张量. 逆变张量基记作 $\boldsymbol{\Theta}^{d_1\cdots d_m}$, 有

$$
\begin{aligned}
(O_u \boldsymbol{T})^{a_1\cdots a_m} &= \sum_{b_1\cdots b_m} \boldsymbol{T}^{b_1\cdots b_m}\left(u^{-1}\right)_{b_1 a_1}\cdots\left(u^{-1}\right)_{b_m a_m} = \sum_{b_1\cdots b_m} u^*_{a_1 b_1}\cdots u^*_{a_m b_m}\boldsymbol{T}^{b_1\cdots b_m} \\
O_u \boldsymbol{\Theta}^{d_1\cdots d_m} &= \sum_{b_1\cdots b_m}\left(u^{-1}\right)_{d_1 b_1}\cdots\left(u^{-1}\right)_{d_m b_m}\boldsymbol{\Theta}^{b_1\cdots b_m} = \sum_{b_1\cdots b_m}\boldsymbol{\Theta}^{b_1\cdots b_m} u^*_{b_1 d_1}\cdots u^*_{b_m d_m}
\end{aligned}
\tag{8.53}
$$

以前定义的矢量和张量分别称为协变矢量和协变张量. 逆变张量空间记作 $\mathcal{T}^*$, 用杨算符 $\mathcal{Y}^{[\tau]}$ 投影, 得不可约张量子空间 $\mathcal{Y}^{[\tau]}\mathcal{T}^* = \mathcal{T}^{[\tau]^*}$, 对应表示用带星号的杨图 $[\tau]^*$ 标记, 子空间的张量基用带星号的正则张量杨表标记.

进一步, 有 n 个协变指标和 m 个逆变指标, 在 SU(N) 变换中按下面规律变换的量称为 $(n,\ m)$ 阶混合张量

$$
\begin{aligned}
(O_u \boldsymbol{T})^{b_1\cdots b_m}_{a_1\cdots a_n} &= \sum_{(a')(b')} u_{a_1 a_1'}\cdots u_{a_n a_n'}\boldsymbol{T}^{b_1'\cdots b_m'}_{a_1'\cdots a_n'}\left(u^{-1}\right)_{b_1' b_1}\cdots\left(u^{-1}\right)_{b_m' b_m} \\
&= \sum_{(a')(b')} u_{a_1 a_1'}\cdots u_{a_n a_n'} u^*_{b_1 b_1'}\cdots u^*_{b_m b_m'}\boldsymbol{T}^{b_1'\cdots b_m'}_{a_1'\cdots a_n'}
\end{aligned}
\tag{8.54}
$$

对混合张量, 可用两个杨算符分别对协变指标和逆变指标进行组合, 把混合张量空间分解为不可约协变张量子空间和不可约逆变张量子空间的直积. 这样的张量子空间是否还存在对 SU(N) 变换不变的更小的子空间呢?

混合张量的一对协变和逆变指标取相同值并求和, 这对指标在 SU(N) 变换中保持不变

$$
\begin{aligned}
\sum_{c=1}^{N}(O_u \boldsymbol{T})^{cb_1\cdots}_{ca_1\cdots} &= \sum_{cdd'} u_{cd}u^*_{cd'}\sum_{(a')(b')} u_{a_1 a_1'}\cdots u^*_{b_1 b_1'}\cdots \boldsymbol{T}^{d'b_1'\cdots}_{da_1'\cdots} \\
&= \sum_{(a')(b')} u_{a_1 a_1'}\cdots u^*_{b_1 b_1'}\cdots\left(\sum_{d}\boldsymbol{T}^{db_1'\cdots}_{da_1'\cdots}\right)
\end{aligned}
\tag{8.55}
$$

这样的张量称为原来张量的迹张量. 一对协变和逆变指标取迹的运算称为张量指标的收缩, $(n,\ m)$ 阶张量的一对指标收缩后, 它的变换性质等同于 $(n-1,\ m-1)$ 阶张量. 无迹张量的集合构成无迹张量子空间, 它是原来混合张量空间的一个关于 SU(N) 变换不变的张量子空间, 迹张量子空间也是一个关于 SU(N) 变换不变的张量子空间.

有一个典型的关于 SU(N) 变换不变的 (1, 1) 阶混合张量 $\boldsymbol{D}$, 它的分量等于克罗内克 (Kronecker)δ 函数

$$\begin{gathered}\boldsymbol{D}_a^b = \delta_a^b = \begin{cases} 1, & a = b \\ 0, & a \neq b \end{cases} \\ (O_u\boldsymbol{D})_a^b = \sum_{a'b'} u_{aa'}u_{bb'}^*\boldsymbol{D}_{a'}^{b'} = \sum_{a'b'} u_{aa'}u_{bb'}^*\delta_{a'}^{b'} = \delta_a^b = \boldsymbol{D}_a^b\end{gathered} \tag{8.56}$$

(1, 1) 阶混合张量 $\boldsymbol{D}$ 构成一维张量空间, 对应恒等表示. 在混合张量空间分解为无迹张量空间和迹张量空间的直和问题中, 不变张量 $\boldsymbol{D}$ 起着重要作用, 例如

$$\boldsymbol{T}_a^b = \left\{\boldsymbol{T}_a^b - \boldsymbol{D}_a^b\left(\frac{1}{N}\sum_c \boldsymbol{T}_c^c\right)\right\} + \boldsymbol{D}_a^b\left(\frac{1}{N}\sum_c \boldsymbol{T}_c^c\right) \tag{8.57}$$

第一项是 (1, 1) 阶无迹混合张量, 而第二项括号里的量是迹张量, 它是零阶张量 (标量), 原来的张量性质由 $\boldsymbol{D}$ 承担.

把混合张量空间分解为无迹张量空间和迹张量空间的直和问题, 原则上是一个简单的代数问题, 但实际计算起来可能相当繁琐. 例如, (2, 1) 阶混合张量 $\boldsymbol{T}_{ab}^d$ 的分解, 就要比上面的例子复杂得多. 设其中的无迹张量为 $\boldsymbol{\Phi}_{ab}^d$

$$\boldsymbol{\Phi}_{ab}^d = \boldsymbol{T}_{ab}^d + \boldsymbol{D}_a^d\sum_{p=1}^N \left\{c_1\boldsymbol{T}_{bp}^p + c_2\boldsymbol{T}_{pb}^p\right\} + \boldsymbol{D}_b^d\sum_{p=1}^N \left\{c_3\boldsymbol{T}_{ap}^p + c_4\boldsymbol{T}_{pa}^p\right\}$$

则根据无迹条件 $\sum_a \boldsymbol{\Phi}_{ab}^a = 0$ 和 $\sum_b \boldsymbol{\Phi}_{ab}^b = 0$, 得

$$\begin{aligned} &1 + Nc_2 + c_4 = 0\ , \qquad &Nc_1 + c_3 = 0, \\ &1 + c_1 + Nc_3 = 0\ , \qquad &c_2 + Nc_4 = 0 \end{aligned}$$

解得

$$c_2 = c_3 = -N/(N^2-1)\ , \qquad c_1 = c_4 = 1/(N^2-1),$$

$$\boldsymbol{\Phi}_{ab}^d = \boldsymbol{T}_{ab}^d + \frac{1}{N^2-1}\left\{\boldsymbol{D}_a^d\sum_{p=1}^N \left(\boldsymbol{T}_{bp}^p - N\boldsymbol{T}_{pb}^p\right) + \boldsymbol{D}_b^d\sum_{p=1}^N \left(\boldsymbol{T}_{pa}^p - N\boldsymbol{T}_{ap}^p\right)\right\}$$

尽管计算比较繁琐, 但原则上混合张量空间可以分解为无迹张量空间和迹张量空间的直和. 如果得到的迹张量仍同时含协变和逆变张量指标, 则可继续分解为无迹张量空间和迹张量空间的直和. 总之, 在混合张量空间中, 为了找出最小的不变子空间, 首先要把混合张量空间分解为一系列无迹张量子空间的直和, 这些无迹张量的指标成对地减少, 然后, 对每一个无迹张量子空间, 用两个杨算符分别投影.

三、无迹混合张量

用两个杨算符对无迹混合张量空间分别投影后, 得到一个对 SU(N) 变换不变的无迹混合张量子空间. 子空间用一对杨图标记, 记作 $[\lambda]\backslash[\tau]^*$, 其中 $[\lambda]$ 和 $[\tau]^*$ 分别代表协变和逆变张量子空间对应的杨图. 子空间的基用一对正则张量杨表标记. 因为加了无迹条件, 这无迹混合张量子空间不等于一个协变张量子空间 $\mathcal{T}^{[\lambda]}$ 和一个逆变张量子空间 $\mathcal{T}^{[\tau]^*}$ 的直乘, 表示 $[\lambda]\backslash[\tau]^*$ 不等价于表示 $[\lambda]$ 和表示 $[\tau]^*$ 的直乘.

首先, 我们要证明, 用杨图 $[\lambda]\backslash[\tau]^*$ 标记的无迹混合张量空间为非零空间的充要条件是杨图 $[\lambda]$ 和 $[\tau]^*$ 的第一列格数之和不大于 N. 证明的方法是确定在什么条件下, 不同的正则张量杨表数目会大于无迹条件的数目, 从而使张量子空间不是零空间.

设杨图 $[\lambda]$ 和杨图 $[\tau]^*$ 的第一列格数分别为 n 和 m. 在此张量子空间中任取一对正则张量杨表, 设它们的第一列格子中有 ℓ 对填数相重. 变动这 ℓ 对填数相同的格子的填数值, 固定所有其他格子的填数, 得到互不相同的张量杨表的对数为

$$\begin{pmatrix} N-(n+m-2\ell) \\ \ell \end{pmatrix}$$

由于张量是无迹的, 这些张量杨表间存在着无迹条件. 固定 $\ell-1$ 对相重的填数, 余下的一对数取迹, 得到一个无迹条件. 无迹条件数目等于这 $\ell-1$ 对相重数所有可能的不同取值数目, 即无迹条件数为

$$\begin{pmatrix} N-(n+m-2\ell) \\ \ell-1 \end{pmatrix}$$

张量子空间为非零空间的充要条件是无迹条件的数目小于不相同的正则张量杨表对数, 即

$$\ell \leqslant \frac{1}{2}\left\{N-(n+m-2\ell)\right\}$$

解得

$$n+m \leqslant N \tag{8.58}$$

其次, 讨论协变张量和逆变张量的正则张量杨表之间的联系. 先讨论 m 阶完全反对称逆变张量 $\boldsymbol{T}^{b_1\cdots b_m}$ 构成的张量子空间, 它对应杨图 $[1^m]^*$, 张量基为正则张量杨表 $\mathcal{Y}^{[1^m]}\boldsymbol{\Theta}^{b_1\cdots b_m}$. 张量子空间维数是 N 个数中取 m 个数的组合数. 将此张量与 N 阶完全反对称协变张量相乘, 并将 m 对指标收缩, 得

$$\boldsymbol{\Phi}_{a_1\cdots a_{N-m}} = \frac{1}{m!}\sum_{b_1\cdots b_m} \epsilon_{a_1\cdots a_{N-m}b_1\cdots b_m}\mathcal{Y}^{[1^m]}\boldsymbol{\Theta}^{b_1\cdots b_m} \tag{8.59}$$

可以用两种观点来理解式 (8.59). 从张量基组合的观点看, 式 (8.59) 给出同一个张量子空间中两组基之间的组合关系. 这两组基分别都是线性无关的, 而且基的数目也相同

$$\begin{pmatrix} N \\ m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N \\ N-m \end{pmatrix}$$

实际上, 式 (8.59) 中的求和式, 把因反对称指标求和产生的重复项与 $m!$ 消去后, 不为零的只有一项, 得到的反对称张量基 $\boldsymbol{\Phi}_{a_1\cdots a_{N-m}}$ 和原来的张量基 $\mathcal{Y}^{[1^m]}\boldsymbol{\Theta}^{b_1\cdots b_m}$ 只是排列次序上的差别, 由它们得到的表示是等价的. 但从张量基的变换规律来看

$$\begin{aligned}
(O_u\boldsymbol{\Phi})_{a_1\cdots a_{N-m}} &= \frac{1}{m!}\sum_{b_1\cdots b_m} \epsilon_{a_1\cdots a_{N-m}b_1\cdots b_m}\left(\mathcal{Y}^{[1^m]}O_u\boldsymbol{\Theta}\right)^{b_1\cdots b_m} \\
&= \frac{1}{m!}\sum_{b_1\cdots b_m}\sum_{d_1\cdots d_{N-m}}\sum_{c_1\cdots c_{N-m}} \epsilon_{d_1\cdots d_{N-m}b_1\cdots b_m}\left(u^*_{c_1d_1}u_{c_1a_1}\right)\cdots \\
&\quad\times\left(u^*_{c_{N-m}d_{N-m}}u_{c_{N-m}a_{N-m}}\right)\sum_{t_1\cdots t_m}\mathcal{Y}^{[1^m]}\boldsymbol{\Theta}^{t_1\cdots t_m}u^*_{t_1b_1}\cdots u^*_{t_mb_m} \\
&= \frac{1}{m!}\sum_{c_1\cdots c_{N-m}}\sum_{t_1\cdots t_m}\mathcal{Y}^{[1^m]}\boldsymbol{\Theta}^{t_1\cdots t_m}u_{c_1a_1}\cdots u_{c_{N-m}a_{N-m}} \\
&\quad\times\left\{\sum_{d_1\cdots d_{N-m}}\sum_{b_1\cdots b_m}u^*_{c_1d_1}\cdots u^*_{c_{N-m}d_{N-m}}u^*_{t_1b_1}\cdots u^*_{t_mb_m}\epsilon_{d_1\cdots d_{N-m}b_1\cdots b_m}\right\} \\
&= \frac{1}{m!}\sum_{c_1\cdots c_{N-m}}\sum_{t_1\cdots t_m}\epsilon_{c_1\cdots c_{N-m}t_1\cdots t_m}\mathcal{Y}^{[1^m]}\boldsymbol{\Theta}^{t_1\cdots t_m}u_{c_1a_1}\cdots u_{c_{N-m}a_{N-m}} \\
&= \sum_{c_1\cdots c_{N-m}}\boldsymbol{\Phi}_{c_1\cdots c_{N-m}}u_{c_1a_1}\cdots u_{c_{N-m}a_{N-m}}
\end{aligned} \tag{8.60}$$

其中, 用到 N 阶完全反对称张量 $\epsilon_{a_1\cdots a_N}$ 的性质式 (1.12)

$$\begin{aligned}
\sum_{d_1\cdots d_N} u_{a_1d_1}\cdots u_{a_Nd_N}\epsilon_{d_1\cdots d_N} &= \epsilon_{a_1\cdots a_N}\sum_{d_1\cdots d_N}u_{1d_1}\cdots u_{Nd_N}\epsilon_{d_1\cdots d_N} \\
&= (\det u)\epsilon_{a_1\cdots a_N} = \epsilon_{a_1\cdots a_N}
\end{aligned} \tag{8.61}$$

式 (8.60) 表明张量基 $\boldsymbol{\Phi}_{a_1\cdots a_{N-m}}$ 的变换规律和 $N-m$ 阶完全反对称协变张量基 $\mathcal{Y}^{[1^{N-m}]}\boldsymbol{\Theta}_{a_1\cdots a_{N-m}}$ 的变换规律完全相同. 因此, m 阶完全反对称逆变张量子空间 $\mathcal{Y}^{[1^m]}\mathcal{T}^*$ 和 $N-m$ 阶完全反对称协变张量子空间 $\mathcal{Y}^{[1^{N-m}]}\mathcal{T}$ 的基之间, 通过式 (8.59) 建立起一一对应关系, 这种对应关系在 SU(N) 变换中保持不变. 两张量子空间等价, 对应的表示也等价

$$[1^m]^* \simeq [1^{N-m}] \tag{8.62}$$

这种逆变张量基和协变张量基互相转化的方法可以推广到更一般的情况 (见附录 33). 设无迹混合张量子空间用一对杨图 $[\lambda]\backslash[\tau]^*$ 描写, 其中杨图 $[\tau]^*$ 的行数为

m, 杨图 $[\lambda]$ 的行数不大于 $N-m$, $[\tau]^*$ 去掉第一列后得杨图 $[\tau']^*$, $[\lambda]$ 从右面补上有 $N-m$ 行的一列后得杨图 $[\lambda']$, 则用一对杨图 $[\lambda']\backslash[\tau']^*$ 描写的无迹混合张量子空间和用一对杨图 $[\lambda]\backslash[\tau]^*$ 描写的无迹混合张量子空间, 它们的张量基可以互相转化, 这两个张量子空间是等价的

$$[\lambda]\backslash[\tau]^* \simeq [\lambda']\backslash[\tau']^* , \qquad \begin{array}{ll} \tau'_j = \tau_j - 1, & 1 \leqslant j \leqslant m, \\ \lambda'_k = \lambda_k + 1, & 1 \leqslant k \leqslant N-m \end{array} \tag{8.63}$$

反复运用式 (8.63), 可以把用杨图 $[\tau]^*$ 标记的逆变张量化为用杨图 $[\lambda]$ 标记的协变张量, 其中

$$[\tau]^* \simeq [\lambda] , \qquad \lambda_j = \tau_1 - \tau_{N-j+1} , \qquad 1 \leqslant j \leqslant N \tag{8.64}$$

把杨图 $[\lambda]$ 倒置, 并从下面与杨图 $[\tau]^*$ 拼起来, 刚好构成一个 $N \times \tau_1$ 的长方形. 因此, SU(N) 群的不等价不可约表示都可用一个行数小于 N 的杨图 $[\lambda]$ 标记, 对应的表示空间等价于用杨算符 $\mathcal{Y}^{[\lambda]}$ 投影的协变张量子空间.

图 8.1 和 8.3 给出了逆变张量表示的张量基与等价的协变张量表示的对应张量基之间的联系. 当初我们是按照互为复共轭表示的对应基的关系式 (7.160) 来计算的. 实际上, 对 SU(N) 群来说, 这关系正是反复应用式 (8.59) 和 (8.63) 的结果.

四、SU(N) 群的伴随表示

以李代数 (李群) 最大根作为最高权的表示是李代数的伴随表示. 式 (7.90) 和 (A29.1) 已经指出, SU(N) 群伴随表示的最高权为 $(1,0,\cdots,0,1)$, 由式 (8.30) 算得伴随表示的杨图为 $[2,1^{N-2}]$. 由上一小节知伴随表示等价于 $(1,1)$ 阶无迹混合张量表示 $[1]\backslash[1]^*$. SU(N) 群的伴随表示是不可约表示, 因而 SU(N) 群是单纯李群, 它不存在不变子李群.

因为在李群中, 伴随表示起着十分重要的作用, 所以本节再用更直接的方法来研究伴随表示, 而且把按伴随表示变换的张量分量和 $(1,1)$ 阶无迹混合张量分量直接联系起来. 根据伴随表示的定义 (7.8), SU(N) 群的伴随表示满足

$$uT_A u^{-1} = \sum_{B=1}^{N^2-1} T_B D^{\text{ad}}_{BA}(u) \tag{8.65}$$

其中, T_A 是 SU(N) 群自身表示的生成元, 它是 $N \times N$ 无迹厄米矩阵. (1, 1) 阶无迹混合张量 $\boldsymbol{T}_a^b$ 在 SU(N) 变换中也有类似的关系

$$(O_u \boldsymbol{T})_a^b = \sum_{a'b'} u_{aa'} \boldsymbol{T}_{a'}^{b'} \left(u^{-1}\right)_{b'b} \tag{8.66}$$

把 $\boldsymbol{T}_a^b$ 看成一个 $N\times N$ 无迹矩阵的 a 行 b 列元素, 则它可按 SU(N) 群自身表示生成元 T_A 展开, $\sqrt{2}\boldsymbol{F}_A$ 是矩阵展开式的系数

$$\boldsymbol{T}_a^b=\sqrt{2}\sum_{A=1}^{N^2-1}(T_A)_{ab}\boldsymbol{F}_A\ ,\qquad \boldsymbol{F}_A=\sqrt{2}\sum_{ab}(T_A)_{ba}\boldsymbol{T}_a^b \tag{8.67}$$

式 (8.67) 也可看作张量分量的重新组合, 把 (1, 1) 阶无迹混合张量 $\boldsymbol{T}_a^b$ 组合成新的张量 $\boldsymbol{F}_A$, 而 $\sqrt{2}\,(T_A)_{ba}$ 是张量的组合系数. 因为是同一张量空间中张量分量的组合, 所以两个张量对应的表示是等价的. 计算新张量 $\boldsymbol{F}_A$ 对应的 SU(N) 群表示

$$O_u\boldsymbol{T}=u\boldsymbol{T}u^{-1}=\sqrt{2}\sum_{A=1}^{N^2-1}uT_Au^{-1}\boldsymbol{F}_A=\sqrt{2}\sum_{B=1}^{N^2-1}T_B\left(\sum_{A=1}^{N^2-1}D_{BA}^{\mathrm{ad}}(u)\boldsymbol{F}_A\right)$$

$$O_u\boldsymbol{T}=\sqrt{2}\sum_{B=1}^{N^2-1}T_B\left(O_u\boldsymbol{F}\right)_B$$

即

$$\left(O_u\boldsymbol{F}\right)_B=\sum_{A=1}^{N^2-1}D_{BA}^{\mathrm{ad}}(u)\boldsymbol{F}_A \tag{8.68}$$

$\boldsymbol{F}_B$ 按 SU(N) 群伴随表示变换. 这说明, SU(N) 群伴随表示等价于 $[1]\backslash[1]^*$ 表示, 即 $[2,1^{N-2}]$ 表示. $\boldsymbol{T}_a^b$ 和 $\boldsymbol{F}_A$ 都描写按伴随表示变换的张量, 但用 $N\times N$ 无迹矩阵 $\boldsymbol{T}_a^b$ 形式更简单. 这是粒子物理中常用的方法.

8.4　SU(3) 对称性和强子波函数

作为物理应用的例子, 讨论 SU(3) 对称性在粒子物理理论中的应用, 介绍广泛应用在粒子物理理论中的平面权图方法. 对 SU(3) 群这样的 2 秩李群, 用平面权图方法研究不可约表示的状态基, 比用方块权图方法更直观. 本节最后部分介绍的强子波函数的计算方法, 充分体现了置换群和 SU(N) 群的密切联系, 这方法有典型意义.

一、夸克的量子数

现代粒子物理理论把 "基本" 粒子分为四类. 参与强相互作用的粒子称为强子, 不参与强相互作用的粒子称为轻子, 传递相互作用的粒子称为规范粒子, 还有一类在理论中专为提供粒子静止质量才引入的粒子, 称为黑格斯 (Higgs) 粒子. 黑格斯粒子目前虽尚未发现, 但它们已成为现代粒子物理理论不可缺少的组成部分. 也有人认为它们可能是一种过渡的概念. 其他还有如超对称理论引入的粒子, 传递引力的所谓引力子等, 目前都还没有观测到.

规范粒子包括传递电磁作用的光子, 传递弱作用的中性玻色子 Z^0 和带电玻色子 $W^{\pm}$, 还有传递强相互作用的胶子 G. 按照现代理论, 轻子分三代, 电子 e 和电子中微子 ν_e, μ 轻子和 μ 中微子 ν_μ, τ 轻子和 τ 中微子 ν_τ. 此外还有它们的反粒子.

本节重点讨论强子. 强子中的费米子称为重子, 玻色子称为介子, 它们都由称为夸克的更基本的粒子组成. 目前了解的夸克有 18 种, 它们由"颜色"和"味道"量子数来区分. 这里所谓的颜色和味道只是一种形象的说法, 与我们日常生活中的颜色和味道的概念毫无关系. 夸克有三种颜色, 常称为红、绿、蓝, 它们是颜色 $SU(3)_c$ 群自身表示的基, 通过 $SU(3)_c$ 规范场, 即胶子场发生强相互作用. 理论和实验研究表明, $SU(3)_c$ 规范作用会产生颜色禁闭的效应, 在目前实验的能量条件下, 无法观测到有颜色的状态, 也就是说, 目前实验中只能观测到对 $SU(3)_c$ 变换的不变态, 称为无色态或颜色单态. 由夸克组成的低能无色态主要有两种, 一种是三个夸克构成的完全反对称态, 由杨图 $[1^3]$ 描写, 另一种是夸克和反夸克构成的收缩态, 也就是 (1, 1) 阶混合张量的迹张量态. 用数学式子表达为

$$\sum_{abc} \epsilon^{abc}\, q_a q_b q_c\ , \qquad \text{和} \qquad \sum_{a=1}^{3} \overline{q}^a q_a \tag{8.69}$$

当然还可能存在由这些态组成的复合态, 但这两种组态是能量较低的强子的基本组态, 前者是重子态, 后者是介子态, 因而夸克带有 1/3 个重子数. 颜色量子数不是本节讨论的重点. 当我们写出三个夸克组成的重子态, 或一对夸克反夸克组成的介子态时, 认为它们的颜色部分已经组成无色态.

夸克有六种味道, 分成三代, 其中上夸克 u 和下夸克 d 是第一代, 粲夸克 c 和奇夸克 s 是第二代, 顶夸克 t 和底夸克 b 是第三代. 列在每代前面的夸克带 2/3 个单位的正电荷, 后面的夸克带 1/3 个单位的负电荷. 在描写电磁作用和弱作用的 $SU(2)\otimes U(1)$ 规范理论 (常称为标准模型) 中, 每一代夸克的左手态构成二重态, 右手态为单态, 其构造与轻子三代相对应.

上夸克 u 和下夸克 d 质量很小, 也比较接近, 它们构成同位旋 SU(2) 的二重态, 这是在强子实验中发现的有条件的同位旋守恒现象在夸克层次上的反映. 在强相互作用中, 同位旋是一个较好的守恒量. 在实验中同位旋守恒提供了很多重要的微观信息. 在弱相互作用和电磁相互作用中, 同位旋守恒遭到破坏.

奇夸克 s 质量虽比上夸克 u 和下夸克 d 大一些, 而且带有称为奇异量子数 S 的新量子数, 但还是统称为轻夸克, 因为它们比起其他三种所谓重夸克来轻很多. 在一定的条件下, 还可以认为这三种轻夸克有近似的味道 SU(3) 对称性, 但在使用这种对称性时必须考虑它的破缺. 同位旋 SU(2) 群是味道 SU(3) 群的子群. 历史上, 味道 SU(3) 对称性曾在寻找未知粒子和预言粒子质量方面起过重要作用. 这是本节要讨论的主要对象. 三种重夸克的质量要比轻夸克大得多, 它们与三种轻夸克间的对称性破缺太大, 一般很少用了. 本书不再讨论.

除了颜色和味道外, 夸克还有一些其他的内部量子数, 如重子数 B, 电荷数 Q, 同位旋 T 及其第三分量 T_3, 奇异量子数 S, 超荷 Y, 它们都列于表 8.1. 除同位旋平方量子数 T 外, 其他量子数对反夸克都改符号. 超荷 Y 定义为重子数 B 和奇异量子数 S 之和, 它与电荷 Q 有密切联系

$$Y = B + S \ , \qquad Q = T_3 + Y/2 \tag{8.70}$$

当然, 夸克还有空间量子数, 如自旋和宇称等.

表 8.1　轻夸克的量子数

夸克	B	T	T_3	S	Y	Q
u	1/3	1/2	1/2	0	1/3	2/3
d	1/3	1/2	−1/2	0	1/3	−1/3
s	1/3	0	0	−1	−2/3	−1/3

二、平面权图

现在研究味道 SU(3) 对称性. SU(3) 群有八个生成元, 其中 T_1, T_2 和 T_3 属同位旋 SU(2) 群. T_3 和 T_8 可以互相对易, 构成 SU(3) 群的嘉当子代数. 夸克场是味道 SU(3) 的协变矢量, 三个夸克态构成味道 SU(3) 群自身表示的基, 在这组基中 T_3 和 T_8 同时对角化

$$T_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad Y = \frac{2}{\sqrt{3}}T_8 = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \tag{8.71}$$

这两个生成元的物理意义十分清楚: T_3 是同位旋的第三分量, Y 是超荷. 这是粒子物理中常采用这组生成元的原因. 它们与谢瓦莱基中的生成元 H_1 和 H_2 相差一个线性组合

$$H_1 = 2T_3 \ , \qquad H_2 = 3Y/2 - T_3 = \sqrt{3}T_8 - T_3 \tag{8.72}$$

夸克态的直乘构成味道 SU(3) 群的张量基, 用杨算符投影后得到的不可约张量基或其适当组合, 就是强子波函数的味道部分. 它们是生成元 H_1 和 H_2 的共同本征函数, 本征值就是权矢量. 这些权在以 T_3 和 T_8 作坐标轴构成的平面图形中画出来就是平面权图. 在平面权图中沿横坐标和纵坐标的单位矢量分别记作 $\boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{e}_1$. 图中的点的横坐标是 T_3 的本征值, 纵坐标是 T_8 的本征值. 由式 (8.72) 算出基本主权 $\boldsymbol{w}_\mu$ 的分量为

$$\boldsymbol{w}_1 = \boldsymbol{e}_2/2 + \boldsymbol{e}_1/(2\sqrt{3}) \ , \qquad \boldsymbol{w}_2 = \boldsymbol{e}_1/\sqrt{3} \tag{8.73}$$

谢瓦莱基的非对角生成元, 在粒子物理中另给了名称. E_1 和 F_1 分别称为 T_+ 和 T_-, 它们是同位旋 (T 旋) 的升降算符, 使 u 和 d 夸克态间发生变换. E_2 和 F_2 分别称为 U_+ 和 U_-, 它们是 U 旋的升降算符, 使 d 和 s 夸克态间发生变换

$$\begin{aligned} &T_+\mathrm{d}=\mathrm{u}\ , \quad T_+\mathrm{u}=T_+\mathrm{s}=0\ , \quad T_-\mathrm{u}=\mathrm{d}\ , \quad T_-\mathrm{d}=T_-\mathrm{s}=0, \\ &U_+\mathrm{s}=\mathrm{d}\ , \quad U_+\mathrm{u}=U_+\mathrm{d}=0\ , \quad U_-\mathrm{d}=\mathrm{s}\ , \quad U_-\mathrm{u}=U_-\mathrm{s}=0 \end{aligned} \tag{8.74}$$

今后在画味道 SU(3) 群的正则张量杨表时, 填充数由 1, 2 和 3 分别改为 u, d 和 s. 反夸克态是味道 SU(3) 的一阶逆变张量基, 是自身表示的复共轭表示的基. 画反夸克态的正则张量杨表时, 填充数由 3, 2 和 1 分别改为 $\overline{\mathrm{s}}$, $\overline{\mathrm{d}}$ 和 $\overline{\mathrm{u}}$. 由式 (7.160) 和 (7.161) 知

$$\begin{aligned} &T_+\overline{\mathrm{u}}=-\overline{\mathrm{d}}\ , \quad T_+\overline{\mathrm{d}}=T_+\overline{\mathrm{s}}=0\ , \quad T_-\overline{\mathrm{d}}=-\overline{\mathrm{u}}\ , \quad T_-\overline{\mathrm{u}}=T_-\overline{\mathrm{s}}=0, \\ &U_+\overline{\mathrm{d}}=-\overline{\mathrm{s}}\ , \quad U_+\overline{\mathrm{u}}=U_+\overline{\mathrm{s}}=0, \quad U_-\overline{\mathrm{s}}=-\overline{\mathrm{d}}\ , \quad U_-\overline{\mathrm{u}}=U_-\overline{\mathrm{d}}=0 \end{aligned} \tag{8.75}$$

$T_\pm$ 算符只改变 T_3 的本征值, 使权矢量在平面权图的水平方向移动 ± 1. 这些权属同一个同位旋多重态, 电荷逐个相差 1. $U_\pm$ 算符同时改变 T_3 和 Y 的本征值, 但保持电荷不变. $U_\pm$ 算符使权矢量沿与水平方向成 $2\pi/3$ 的角度方向移动, U_+ 使 T_3 减少 1/2, 使 Y 增加 1, U_- 则相反. 这些态属同一个 U 旋多重态, 它们有相同的电荷.

强子由夸克和 (或) 反夸克构成, 强子波函数是夸克和 (或) 反夸克波函数的直乘, 并用适当的杨算符投影, 也就是正则张量杨表. 由于外尔互反性和直乘表示生成元的作用规则, 生成元对正则张量杨表的作用, 可按式 (8.74) 和 (8.75) 作用在每个夸克和 (或) 反夸克指标上, 然后相加. 因为目前实验中能观测到的粒子都是无色态, 所以强子一定是由三的倍数个夸克和 (或) 成对的夸克反夸克构成. 用数学的话来说, 它们是 $\mathrm{SU}(3)/Z_3$ 群的单值表示, 其中 Z_3 群是 SU(3) 群的中心, 由三个常数矩阵构成的三阶群.

在画平面权图时, 首先确定最高权的位置, 然后用降算符 T_- 和 U_- 作用, 得到其他权的位置. 遇到重权则用 $\mathcal{A}_1$ 的多重态来区分. 用现在的符号来说, 就是用同位旋平方的量子数 T 来区分. 用生成元 T_3 和 Y 的本征值来描写权矢量时, 比较两个权的高低, 首先比较 Y 本征值的大小, 在 Y 本征值相同的情况下, 比较 T_3 本征值的大小. 对夸克场来说, u 夸克的权最高, d 夸克的权其次, s 夸克的权最低. 对反夸克, 权大小的排列次序正相反. SU(3) 群不可约表示的杨图只有两行. 最高权的正则张量杨表, 第一行填 u 夸克, 第二行填 d 夸克.

SU(3) 群的平面权图分为三种类型.

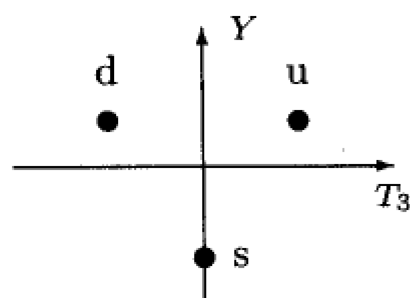
(1) 一行的杨图 $[\lambda,0]$, 权图是倒置的正三角形, 边长为 λ. 复共轭表示的杨图为 $[\lambda,\lambda]\simeq[\lambda,0]^*$, 权图是正置的正三角形. 权图中所有权都是单权.

在表示 $[\lambda,0]$ 最高权态的正则张量杨表中所有格子都填 u, 因而

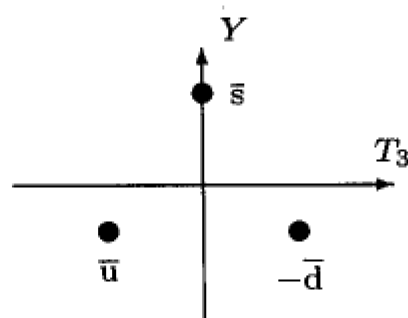
$$Y=\lambda/3\ ,\qquad T_3=\lambda/2 \tag{8.76}$$

由最高权态出发, 用 T_- 作用, 逐个把 u 改为 d, 它们构成一个同位旋 $\lambda+1$ 重态, 形成倒置正三角形的上边. 然后再把 U_- 作用在这些态上, 逐个把 d 改为 s, 构成 U 旋多重态. 在权图上表现为与 T_3 轴成 $2\pi/3$ 角的斜线. 所有权都是单权. 复共轭表示 $[\lambda,\lambda]\simeq[\lambda,0]^*$ 的态, 权矢量反号, 权图是正置的正三角形. 两权图互为对原点的反演. 表示 $[1,0]$, $[1,1]\simeq[1,0]^*$ 和 $[3,0]$ 的平面权图见图 8.5. 请注意权图 $[1,0]^*$ 中态前面的符号 (也见图 8.1), 它由式 (8.59) 的变换决定. 实验中发现的宇称为正和自旋为 3/2 的低能重子, 属于表示 $[3,0]$, 常称为 $(3/2)^+$ 十重态重子. 十重态中包含四个同位旋多重态, 分别称为 N^*, Σ^*, Ξ^* 和 Ω, 各种粒子状态的波函数列举如下

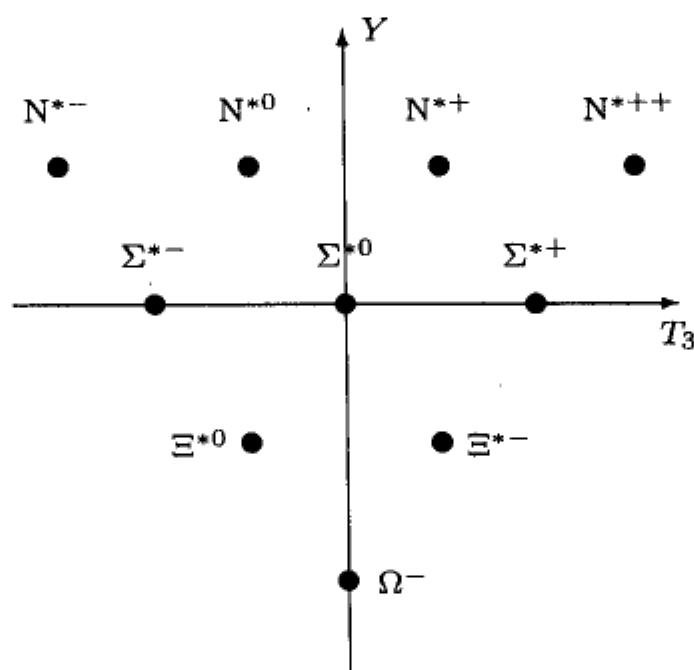
$$\begin{aligned}
&N^{*++}=\boxed{u\,|\,u\,|\,u}\,,\qquad N^{*+}=\sqrt{3}\,\boxed{u\,|\,u\,|\,d}\,,\qquad N^{*0}=\sqrt{3}\,\boxed{u\,|\,d\,|\,d}\,,\\
&N^{*-}=\boxed{d\,|\,d\,|\,d}\,,\\
&\Sigma^{*+}=\sqrt{3}\,\boxed{u\,|\,u\,|\,s}\,,\qquad \Sigma^{*0}=\sqrt{6}\,\boxed{u\,|\,d\,|\,s}\,,\qquad \Sigma^{*-}=\sqrt{3}\,\boxed{d\,|\,d\,|\,s}\,,\\
&\Xi^{*0}=\sqrt{3}\,\boxed{u\,|\,s\,|\,s}\,,\qquad \Xi^{*-}=\sqrt{3}\,\boxed{d\,|\,s\,|\,s}\,,\qquad \Omega^{-}=\boxed{s\,|\,s\,|\,s}
\end{aligned}\tag{8.77}$$



(1) 表示 $[1,0]$ 的权图



(2) 表示 $[1,0]^*$ 的权图



(3) 表示 $[3,0]$ 的权图

图 8.5　SU(3) 群若干表示 $[\lambda,0]$ 的平面权图

(2) 杨图 $[2\lambda,\lambda]\simeq[\lambda,0]\backslash[\lambda,0]^*$, 权图是正六边形, 边长 λ, 处于外边线上的状态对应单权, 向中心每走一格, 状态的权重数增加 1, 到原点权的重数为 $\lambda+1$.

最高权对应的正则张量杨表, 第一行的格子都填 u, 第二行的格子都填 d, 因而表示 $[2\lambda,\lambda]$ 的最高权为

$$Y=\lambda\ ,\qquad T_3=\lambda/2 \tag{8.78}$$

由最高权出发, 用 T_- 作用, 逐个把处于单行格子中的 u 改为 d. 处于双行格子中的 u 不能改, 因为同一列不能填相同的夸克. 这样得到一个同位旋 $\lambda+1$ 重态, 对应的权处在权图正六边形的上边, 这些权都是单权. 然后用 U_- 作用在这些态上, 逐个把 d 改为 s. 因为在这些正则张量杨表中, d 分别填在第一行和第二行, 所以有几种 d 到 s 的换法, 得到不同的正则分量杨表, 对应重权. 重权对应的状态基由同位旋多重态来区分. 由正六边形外边向中心走, 权的重数逐渐增加. 经过 λ 步走到原点, 权减为零, 重数增加到 $\lambda+1$. 零权对应的正则张量杨表中填有 u, d 和 s 各 λ 个, 其中 u 都填在第一行的左面, 根据第二行中填 d 个数的不同来区分 $\lambda+1$ 个不同的正则张量杨表. 图 8.6 给出表示 $[2,1]\simeq[1]\backslash[1]^*$ 的平面权图.

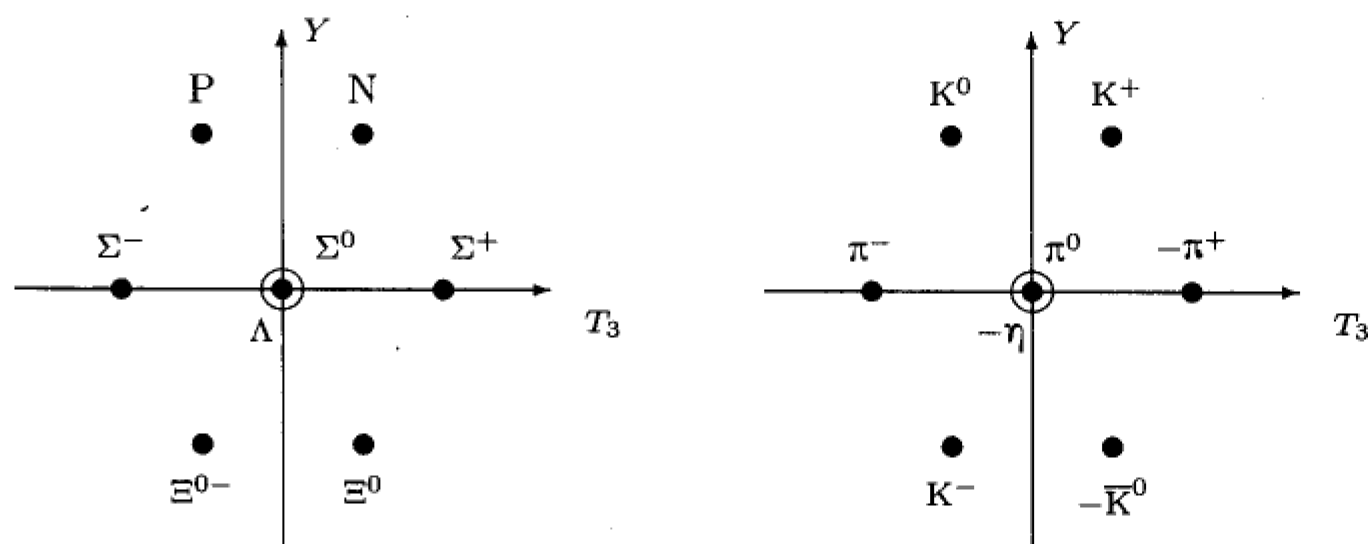
实验中发现的宇称为正和自旋为 1/2 的低能重子, 常称 $(1/2)^+$ 八重态重子 [见图 8.6 (1)], 它们由三个夸克组成. 20 世纪 60 年代实验上已发现能量较低的介子有宇称为负和自旋为 0 的所谓 0^- 八重态标量介子 [见图 8.6 (2)] 和宇称为负自旋为 1 的所谓 1^- 八重态矢量介子, 另外还有一个宇称为负自旋为 1 的所谓 1^- 单态矢量介子. 八重态重子和标量 (矢量) 介子的名称及其波函数 (正则张量杨表) 列于下式

$$\begin{array}{ll}
\text{重子} & \text{标量介子} \\
\mathrm{P}=\begin{array}{l}\mathrm{uu}\\ \mathrm{d}\end{array} & \mathrm{K}^+=\mathrm{u}\bar{\mathrm{s}} \\
\mathrm{N}=\begin{array}{l}\mathrm{ud}\\ \mathrm{d}\end{array} & \mathrm{K}^0=\mathrm{d}\bar{\mathrm{s}} \\
\Sigma^+=\begin{array}{l}\mathrm{uu}\\ \mathrm{s}\end{array} & -\pi^+=-\ \mathrm{u}\bar{\mathrm{d}} \\
\Sigma^0=\sqrt{1/2}\left\{2\ \begin{array}{l}\mathrm{ud}\\ \mathrm{s}\end{array}-\begin{array}{l}\mathrm{us}\\ \mathrm{d}\end{array}\right\} & \pi^0=\sqrt{1/2}\left\{\mathrm{u}\bar{\mathrm{u}}-\mathrm{d}\bar{\mathrm{d}}\right\} \\
\Sigma^-=\begin{array}{l}\mathrm{dd}\\ \mathrm{s}\end{array} & \pi^-=\mathrm{d}\bar{\mathrm{u}} \\
\Lambda=\sqrt{3/2}\ \begin{array}{l}\mathrm{us}\\ \mathrm{d}\end{array} & -\eta=-\sqrt{1/6}\left\{\mathrm{u}\bar{\mathrm{u}}+\mathrm{d}\bar{\mathrm{d}}-2\mathrm{s}\bar{\mathrm{s}}\right\} \\
\Xi^0=\begin{array}{l}\mathrm{us}\\ \mathrm{s}\end{array} & -\overline{\mathrm{K}^0}=-\ \mathrm{s}\bar{\mathrm{d}} \\
\Xi^-=\begin{array}{l}\mathrm{ds}\\ \mathrm{s}\end{array} & \mathrm{K}^-=\mathrm{s}\bar{\mathrm{u}}
\end{array} \tag{8.79}$$

标量介子与矢量介子的对应如下

$$\pi \longleftrightarrow \rho\,, \qquad \mathrm{K} \longleftrightarrow \mathrm{K}^*\,, \qquad \eta \longleftrightarrow \omega \tag{8.80}$$

1^- 单态矢量介子称为 ϕ 粒子.



(1) 重子的表示 [2, 1]　　　　(2) 轻子的表示 [1]\[1]*

图 8.6　SU(3) 群伴随表示 [2, 1] 的平面权图

介子波函数有两种计算方法, 一种是由最高权出发, 利用降算符作用的公式 (8.74) 和 (8.75) 计算得到

$$\begin{aligned}
&\mathrm{K}^+ = \boxed{\text{u}}\backslash\boxed{\text{s}}^{*}\,, \qquad \mathrm{K}^0 = F_1\,\mathrm{K}^+ = F_1\,\boxed{\text{u}}\backslash\boxed{\text{s}}^{*} = \boxed{\text{d}}\backslash\boxed{\text{s}}^{*}\,,\\
&-\pi^+ = F_2\,\mathrm{K}^+ = F_2\,\boxed{\text{u}}\backslash\boxed{\text{s}}^{*} = -\boxed{\text{u}}\backslash\boxed{\text{d}}^{*}\,,\\
&\pi^0 = \sqrt{\frac{1}{2}}F_1\,(-\pi^+) = -\sqrt{\frac{1}{2}}F_1\,\boxed{\text{u}}\backslash\boxed{\text{d}}^{*} = \sqrt{\frac{1}{2}}\left\{\boxed{\text{u}}\backslash\boxed{\text{u}}^{*} - \boxed{\text{d}}\backslash\boxed{\text{d}}^{*}\right\}\,,\\
&\pi^- = \sqrt{\frac{1}{2}}F_1\,\pi^0 = \frac{1}{2}F_1\left\{\boxed{\text{u}}\backslash\boxed{\text{u}}^{*} - \boxed{\text{d}}\backslash\boxed{\text{d}}^{*}\right\} = \boxed{\text{d}}\backslash\boxed{\text{u}}^{*}\,,\\
&-\eta = \sqrt{\frac{2}{3}}\left\{F_2\,\mathrm{K}^0 - \sqrt{\frac{1}{2}}\pi^0\right\} = \sqrt{\frac{1}{6}}\left\{2F_2\,\boxed{\text{d}}\backslash\boxed{\text{s}}^{*} - \boxed{\text{u}}\backslash\boxed{\text{u}}^{*} + \boxed{\text{d}}\backslash\boxed{\text{d}}^{*}\right\}\\
&\quad = \sqrt{\frac{1}{6}}\left\{2\,\boxed{\text{s}}\backslash\boxed{\text{s}}^{*} - \boxed{\text{u}}\backslash\boxed{\text{u}}^{*} - \boxed{\text{d}}\backslash\boxed{\text{d}}^{*}\right\}\,,\\
&-\overline{\mathrm{K}}^0 = \sqrt{2}F_2\,\pi^0 = F_2\left\{\boxed{\text{u}}\backslash\boxed{\text{u}}^{*} - \boxed{\text{d}}\backslash\boxed{\text{d}}^{*}\right\} = -\boxed{\text{s}}\backslash\boxed{\text{d}}^{*}\,,\\
&\mathrm{K}^- = F_1\left(-\overline{\mathrm{K}}^0\right) = -F_1\,\boxed{\text{s}}\backslash\boxed{\text{d}}^{*} = \boxed{\text{s}}\backslash\boxed{\text{u}}^{*}
\end{aligned} \tag{8.81}$$

另一种方法是采用式 (8.59) 的变换来计算, 这里只算 π^0 和 $-\eta$ 的波函数. 应用式 (8.23), 有

$$
\begin{aligned}
3\begin{array}{|c|c|}\hline u & d \\ \hline s \\ \cline{1-1}\end{array} &= 2\begin{array}{|c|c|}\hline u & d \\ \hline s \\ \cline{1-1}\end{array} + \begin{array}{|c|c|}\hline d & u \\ \hline s \\ \cline{1-1}\end{array} + \begin{array}{|c|c|}\hline u & s \\ \hline d \\ \cline{1-1}\end{array} \\
&= -2\,\boxed{d}\backslash\boxed{d}^* + \boxed{u}\backslash\boxed{u}^* + \boxed{s}\backslash\boxed{s}^* , \\
3\begin{array}{|c|c|}\hline u & s \\ \hline d \\ \cline{1-1}\end{array} &= 2\begin{array}{|c|c|}\hline u & s \\ \hline d \\ \cline{1-1}\end{array} + \begin{array}{|c|c|}\hline s & u \\ \hline d \\ \cline{1-1}\end{array} + \begin{array}{|c|c|}\hline u & d \\ \hline s \\ \cline{1-1}\end{array} \\
&= 2\,\boxed{s}\backslash\boxed{s}^* - \boxed{u}\backslash\boxed{u}^* - \boxed{d}\backslash\boxed{d}^*
\end{aligned}
\tag{8.82}
$$

由此得

$$
\pi^0 = \sqrt{2}\begin{array}{|c|c|}\hline u & d \\ \hline s \\ \cline{1-1}\end{array} - \sqrt{\frac{1}{2}}\begin{array}{|c|c|}\hline u & s \\ \hline d \\ \cline{1-1}\end{array} = \sqrt{\frac{1}{2}}\left\{\boxed{u}\backslash\boxed{u}^* - \boxed{d}\backslash\boxed{d}^*\right\} ,
$$

$$
-\eta = \sqrt{\frac{3}{2}}\begin{array}{|c|c|}\hline u & s \\ \hline d \\ \cline{1-1}\end{array} = \sqrt{\frac{1}{6}}\left\{2\,\boxed{s}\backslash\boxed{s}^* - \boxed{u}\backslash\boxed{u}^* - \boxed{d}\backslash\boxed{d}^*\right\}
$$

(3) 杨图 $[\lambda_1, \lambda_2]$, $\lambda_1 > 2\lambda_2 > 0$, 权图是六边形. 不相邻的三条边长度相同. 上边长为 $\lambda_1 - \lambda_2$, 底边长为 λ_2. 处于外边线上的状态对应单权, 向里每走一格, 状态的权重数增加 1, 直至六边形变成倒置的正三角形, 权的重数不再增加, 固定为 $\lambda_2 + 1$. 把 λ_2 换成 $\lambda_1 - \lambda_2$, 就得到复共轭表示. 表示 $[\lambda_1, \lambda_2]$ 的最高权为

$$
Y = (\lambda_1 + \lambda_2)/3 , \qquad T_3 = (\lambda_1 - \lambda_2)/2 \tag{8.83}
$$

对这类表示物理上目前兴趣不大, 因为它包含的夸克数不能被 3 除尽, 对应有色态, 现有实验观测不到.

三、质量公式

建立一个简单模型来研究属同一味道 SU(3) 多重态强子的质量关系. 这些强子都由夸克和反夸克构成, 假设 u 和 d 夸克及其反夸克质量相同, 为 m_1, 而 s 夸克质量较重, 为 m_2. 设想属同一多重态的强子, 结合能 $-V$ 相同. 根据这一简单模型, 由图 8.5 得十重态重子的质量为

$$
\begin{aligned}
&M(\mathrm{N}^*) = 3m_1 - V , && M(\Sigma^*) = 2m_1 + m_2 - V, \\
&M(\Xi^*) = m_1 + 2m_2 - V , && M(\Omega) = 3m_2 - V
\end{aligned}
$$

由此得质量关系

$$
M(\Omega) - M(\Xi^*) = M(\Xi^*) - M(\Sigma^*) = M(\Sigma^*) - M(\mathrm{N}^*) \tag{8.84}
$$

根据实验测量结果, 对同位旋多重态取平均, 得

$$
\begin{aligned}
M_{\mathrm{N}^*} &= 1232\mathrm{MeV}\ , \qquad & M_{\Sigma^*} &= 1384.6\mathrm{MeV}, \\
M_{\Xi^*} &= 1531.8\mathrm{MeV}\ , \qquad & M_{\Omega} &= 1672.5\mathrm{MeV},
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
M(\Omega) - M(\Xi^*) &= 140.7\mathrm{MeV}, \\
M(\Xi^*) - M(\Sigma^*) &= 147.2\mathrm{MeV}, \\
M(\Sigma^*) - M(\mathrm{N}^*) &= 152.6\mathrm{MeV}
\end{aligned}
$$

虽然模型十分简单, 但理论和实验符合得相当好. 20 世纪 60 年代初曾根据这质量公式, 预言质量在 1680MeV 附近应该有自旋宇称为 $(3/2)^+$, 超荷为 -2, 电荷为 -1 的同位旋单态重子, 后来果真在实验中发现了 Ω 重子.

把这简单化的模型用到八重态重子, 首先遇到一个问题就是 Σ 重子和 Λ 重子都由两个 u 或 d 夸克, 一个 s 夸克构成, 因此它们的质量应该相等, 这与实验不符. 可见这模型过于简单. 仔细分析知道, s 夸克质量与 u 和 d 夸克质量不同, 相当存在变换性质与 Y 相同的破缺哈密顿量, 通常称为 "33" 破缺, 指的是破缺哈密顿量正比于自身表示的第三行第三列矩阵元素. 引入粒子的质量算符 $\boldsymbol{M}$, 它的主要部分是 SU(3) 不变的, 微扰项属 SU(3) 的伴随表示, 只对同位旋 SU(2) 保持不变. 这样的微扰项能包含几个参数? 设粒子的场函数 Ψ 属于 SU(3) 表示 $[\lambda]$, 由于已经把破缺部分放在质量算符里了, 整个质量项 $\overline{\Psi}\boldsymbol{M}\Psi$ 仍是 SU(3) 不变的, 这就要求

$$
[2,1]\times[\lambda]\ \longrightarrow\ [\lambda]
$$

在这克莱布施 – 戈登级数中出现表示 $[\lambda]$ 的重数, 就是允许引入的质量微扰项的参数数目. 按照立特武德 – 理查森规则, 当 $[\lambda]$ 是一行的杨图 (或其复共轭表示) 时, 只允许一个微扰参数, 当 $[\lambda]$ 是两行长度不同的杨图时, 允许引入两个微扰参数. 这就是上述简单模型对十重态重子很成功, 而对八重态重子明显不合理的原因.

盖尔曼 (Gell-Mann)、西岛 (Nishijima) 和大久保 (Okubo) 把质量算符表成味道 SU(3) 生成元的乘积形式, 要求每一项对同位旋 SU(2) 变换保持不变, 且属于恒等表示或伴随表示. 因为至多只有两个微扰参数, 所以写到生成元的二次项已经足够了. 常数项是 SU(3) 不变的, 满足上述要求的一次项只有 Y. 同位旋 SU(2) 不变的二次项可有 Y^2 和 T^2 两个独立项, 它们属于两个伴随表示直乘的对称组合. 因为在两个伴随表示直乘分解的克莱布施 – 戈登级数中, 属对称组合的表示有 $[2,2]$, $[1,1]_S$ 和 $[0,0]$(见图 7.10 或 8.3 节第一小节的末尾), 所以这两个独立的二次项必须适当组合, 以排除属表示 $[2,2]$ 的部分. 设我们要找的组合为 Y^2+cT^2, 它属于恒等表示和伴随表示直和的表示空间. 根据上述讨论, 把质量算符写成本征值形式, 就是所谓的质量公式

$$
M = M_0 + M_1 Y + M_2\left[Y^2 + cT(T+1)\right]
$$

其中, $T(T+1)$ 是生成元 T^2 的本征值, c 是待定参数. 这公式对重子十重态也应该成立, 故有

$$Y^2 + cT(T+1) = a + bY.$$

以重子十重态的量子数代入, 解出参数 a, b 和 c. 对 Ω 重子, $Y=-2$ 和 $T=0$, 得 $4=a-2b$. 对 Ξ^* 重子, $Y=-1$ 和 $T=1/2$, 得 $1+3c/4=a-b$. 对 Σ^* 重子, $Y=0$ 和 $T=1$, 得 $2c=a$. 解得

$$a=-8\ ,\qquad b=-6\ ,\qquad c=-4$$

用重子 N^* 来检验, $Y=1$ 和 $T=3/2$, 得 $1+15c/4=a+b$, 此式满足. 这样就得到著名的盖尔曼 - 西岛 - 大久保关系

$$M(T,Y) = M_0 + M_1 Y + M_2\left\{Y^2 - 4T(T+1)\right\} \tag{8.85}$$

对八重态重子

$$\begin{aligned} &M(\mathrm{N}) = M_0 + M_1 - 2M_2\ , &&M(\Sigma) = M_0 - 8M_2 \\ &M(\Lambda) = M_0\ , &&M(\Xi) = M_0 - M_1 - 2M_2 \end{aligned}$$

$$\frac{M(\mathrm{N}) + M(\Xi)}{2} = \frac{M(\Sigma) + 3M(\Lambda)}{4} \tag{8.86}$$

以实验数据代入

$$\begin{aligned} &M(\mathrm{N}) = 938.9\mathrm{MeV}\ , &&M(\Sigma) = 1193.1\mathrm{MeV} \\ &M(\Lambda) = 1115.7\mathrm{MeV}\ , &&M(\Xi) = 1318.1\mathrm{MeV} \end{aligned}$$

式 (8.86) 左面是 1128.5MeV, 右面是 1135.1MeV, 符合得相当好.

把盖尔曼 - 西岛 - 大久保关系用到 0^- 介子八重态时, 结果不很理想. 人们很快发现把质量公式看成质量平方的公式则符合得相当好. 其中原因并不十分清楚, 可能因为哈密顿量中的质量项, 费米子是以质量一次方出现的, 而玻色子是以质量二次方出现的. 具体实验数据如下

$$m(\pi) = 138.0\mathrm{MeV},\qquad m(\mathrm{K}) = 495.7\mathrm{MeV},\qquad m(\eta) = 547.5\mathrm{MeV}$$

式 (8.86) 的 M 理解为质量平方 m^2, 等式左面是 $0.2457\mathrm{GeV}^2$, 右面是 $0.2296\mathrm{GeV}^2$, 符合得相当好. 当把盖尔曼 - 西岛 - 大久保关系用到 1^- 介子八重态时, 结果又不很理想. 有人提出, 由于作为 1^- 单态的介子 φ 与属于 1^- 八重态的介子 ω, 除了属 SU(3) 群不同表示外, 其他量子数完全相同. 注意到质量算符属伴随表示, 它是可以使八重态 (伴随表示) 和单态 (恒等表示) 发生混合的. 这种混合使介子质量偏离盖尔曼 - 西岛 - 大久保关系.

四、介子波函数

低能介子由一对夸克和反夸克组成, 轨道角动量为零, 介子波函数是三部分的乘积: 颜色波函数, 味道波函数和自旋波函数. 因为夸克和反夸克不是全同粒子, 不必考虑总波函数的置换对称性. (1, 1) 阶混合张量中可分解出无迹张量和迹张量两个多重态

$$\square \times \square^{*} = \square\backslash\square^{*} \oplus \mathbf{1}$$

其中, 颜色和味道部分是 SU(3) 群, 而自旋部分是 SU(2) 群. 为了构成无色态, 波函数的颜色部分只能取为单态的迹张量. 味道部分可以是八重态 (无迹张量) 和单态 (迹张量). 自旋部分无迹张量是矢量介子, 迹张量是标量介子. 实验上较早发现的能量较低的介子宇称都为负, 它们是前面介绍过的 0^- 八重态介子, 1^- 八重态和单态介子, 后来才发现 0^- 单态介子 η'.

如果把夸克和反夸克的自旋波函数分别记作 $(\psi_+; \psi_-)$ 和 $(-\overline{\psi^-}, \overline{\psi^+})$, 标量介子的自旋波函数是迹张量, 有

$$S=0, \qquad S_3=0: \qquad \sqrt{1/2}\left(\overline{\psi^+}\psi_+ + \overline{\psi^-}\psi_-\right) \tag{8.87}$$

由式 (7.156), 矢量介子自旋的最高权态波函数容易写出, 再用降算符作用得其他状态波函数

$$\begin{aligned} S=1\,, \qquad & S_3=1: && -\overline{\psi^-}\psi_+ \\ & S_3=0: && \sqrt{1/2}\left(\overline{\psi^+}\psi_+ - \overline{\psi^-}\psi_-\right) \\ & S_3=-1: && \overline{\psi^+}\psi_- \end{aligned} \tag{8.88}$$

单态介子的味道波函数就是迹张量

$$\sqrt{\frac{1}{3}}\left\{\boxed{\mathrm{u}}\backslash\boxed{\mathrm{u}}^{*} + \boxed{\mathrm{d}}\backslash\boxed{\mathrm{d}}^{*} + \boxed{\mathrm{s}}\backslash\boxed{\mathrm{s}}^{*}\right\} \tag{8.89}$$

八重态介子的味道波函数由式 (8.81) 给出. 在粒子物理中经常把它们写成三维无迹矩阵的形式, 行指标是协变张量指标, 列指标是逆变张量指标. 作为张量基, 例如

$$\pi^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \pi^0 = \sqrt{\frac{1}{2}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \eta = \sqrt{\frac{1}{6}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

如果把八重态介子看成同一个粒子的不同状态, 它的味道波函数用三维无迹张量描写. 无迹张量按式 (8.81) 给出的基展开, 展开系数是相应介子的味道波函数, 用介

子的名字表出

$$
\boldsymbol{M}=\begin{pmatrix} \dfrac{\pi^0}{\sqrt{2}}+\dfrac{\eta}{\sqrt{6}} & \pi^+ & \mathrm{K}^+ \\ \pi^- & -\dfrac{\pi^0}{\sqrt{2}}+\dfrac{\eta}{\sqrt{6}} & \mathrm{K}^0 \\ \mathrm{K}^- & \overline{\mathrm{K}^0} & -\dfrac{2\eta}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \tag{8.90}
$$

在 SU(3) 变换 u 中它按下式变换

$$
\boldsymbol{M} \xrightarrow{u} u\boldsymbol{M}u^{-1} \tag{8.91}
$$

八重态介子的味道波函数也可以按照式 (8.67) 写成八维实正交表示波函数形式

$$
\begin{aligned}
&(\mathbf{M}_1+\mathrm{i}\mathbf{M}_2)/\sqrt{2}=\pi^- , && (\mathbf{M}_1-\mathrm{i}\mathbf{M}_2)/\sqrt{2}=\pi^+ \\
&(\mathbf{M}_4+\mathrm{i}\mathbf{M}_5)/\sqrt{2}=\mathrm{K}^- , && (\mathbf{M}_4-\mathrm{i}\mathbf{M}_5)/\sqrt{2}=\mathrm{K}^+ \\
&(\mathbf{M}_6+\mathrm{i}\mathbf{M}_7)/\sqrt{2}=\overline{\mathrm{K}^0} , && (\mathbf{M}_6-\mathrm{i}\mathbf{M}_7)/\sqrt{2}=\mathrm{K}^0 \\
&\mathbf{M}_3=\pi^0 , && \mathbf{M}_8=\eta
\end{aligned} \tag{8.92}
$$

它们的关系就像 SO(3) 群的自身表示和 D^1 表示的关系. 在实际计算中, SU(3) 群伴随表示的这种实正交形式用得较少.

粒子物理中也常把八重态重子的味道波函数写成三维无迹矩阵的形式. 由于式 (8.79) 给出的重子和介子的对应关系, 在矩阵形式中会出现若干负号

$$
\mathbf{B}=\begin{pmatrix} \dfrac{\Sigma^0}{\sqrt{2}}-\dfrac{\Lambda}{\sqrt{6}} & -\Sigma^+ & \mathrm{P} \\ \Sigma^- & -\dfrac{\Sigma^0}{\sqrt{2}}-\dfrac{\Lambda}{\sqrt{6}} & \mathrm{N} \\ \Xi^- & -\Xi^0 & \dfrac{2\Lambda}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \tag{8.93}
$$

五、重子波函数

低能重子由三个夸克组成, 三个夸克是全同的费米子, 按照费米统计的要求, 它们的波函数必须对夸克置换反对称. 假定低能重子轨道角动量为零, 总波函数是颜色, 味道和自旋三部分波函数的乘积. 三个夸克组成三阶张量, 按照杨图外积的规则得

$$
\square \times \square \times \square \simeq \begin{array}{|c|c|c|}\hline & & \\ \hline\end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|}\hline & \\ \hline \\ \cline{1-1}\end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|}\hline & \\ \hline \\ \cline{1-1}\end{array} \oplus \begin{array}{|c|}\hline \\ \hline \\ \hline \\ \hline\end{array} \tag{8.94}
$$

$$
[1]\times[1]\times[1]\simeq[3]\oplus[2,1]\oplus[2,1]\oplus[1^3]
$$

这些波函数在置换变换中的变换性质, 也由这些杨图标记. 为了构成无色态, 颜色波函数必须处于色单态, 对应杨图 $[1^3]$, 在置换变换中是完全反对称态. 这就决定了味道和自旋波函数的乘积在置换变换中必须是完全对称态.

味道波函数有三种可能的选择, 味道 SU(3) 的 [3] 表示是十重态, 在置换变换中是完全对称态, [2, 1] 表示是八重态, 两个八重态在置换变换中构成二维表示, 称为混合对称态, $[1^3]$ 表示是单态, 在置换变换中是完全反对称态. 自旋对应的是 SU(2) 群, 杨图 $[1^3]$ 对应零空间, 因此自旋波函数只有两种可能的选择, [3] 表示是四重态, 自旋为 3/2, 在置换变换中是完全对称态, [2, 1] 表示是二重态, 自旋为 1/2, 两个二重态在置换变换中构成混合对称态.

因为味道和自旋波函数的乘积在置换变换中必须是完全对称态, 所以味道十重态必须配上自旋四重态 ($S = 3/2$), 味道八重态必须配上自旋二重态 ($S = 1/2$), 味道单态则无法构成满足费米统计的重子态. 这就解释了最先发现的低能重子只有 $(3/2)^+$ 十重态重子和 $(1/2)^+$ 八重态重子. 具体写出重子波函数时必须真正把它们组合成对置换变换的完全反对称态, 以满足费米统计. 颜色波函数已按式 (8.69) 明确写出, 这里只写味道和自旋波函数的乘积, 它们对置换变换是完全对称态. 在下面展开式的每一项, 都应该理解为已对三种颜色态做完全反对称组合.

(1) 十重态 $(3/2)^+$ 重子. 写两个有代表性的重子态作为例子.

$\mathrm{N}^{*+}_{1/2}$, $T = 3/2$, $T_3 = 1/2$, $Y = 1$, 和 $S_3 = 1/2$. 下标表 S_3, 上标表电荷. 波函数表为两部分的乘积

$$\boxed{u \mid u \mid d} \cdot \boxed{+ \mid + \mid -}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{N}^{*+}_{1/2} \;=\; & \frac{1}{3}\{u_+u_+d_- + u_+d_+u_- + d_+u_+u_- + u_+u_-d_+ + u_+d_-u_+ \\ & + d_+u_-u_+ + u_-u_+d_+ + u_-d_+u_+ + d_-u_+u_+\}\end{aligned}$$

$\Sigma^{*0}_{-1/2}$, $T = 1$, $T_3 = 0$, $Y = 0$, 和 $S_3 = -1/2$. 波函数表为两部分的乘积

$$\boxed{u \mid d \mid s} \cdot \boxed{+ \mid - \mid -}$$

$$\begin{aligned}\Sigma^{*0}_{-1/2} \;=\; & \frac{1}{3\sqrt{2}}\{u_+d_-s_- + u_+s_-d_- + d_+u_-s_- + d_+s_-u_- \\ & + s_+u_-d_- + s_+d_-u_- + u_-d_+s_- + u_-s_+d_- + d_-u_+s_- \\ & + d_-s_+u_- + s_-u_+d_- + s_-d_+u_- + u_-d_-s_+ + u_-s_-d_+ \\ & + d_-u_-s_+ + d_-s_-u_+ + s_-u_-d_+ + s_-d_-u_+\}\end{aligned}$$

(2) 八重态 $(1/2)^+$ 重子. 在这种情况下, 对置换群来说, 味道波函数和自旋波函数都属二维表示, 乘起来后构成四维表示, 包含置换群的对称表示, 反对称表示和混合对称表示. 费米统计要求把波函数组合成全对称态, 即属于置换群的恒等表示.

例如, 写质子自旋 $S_3=-1/2$ 态的波函数, $T=T_3=1/2$, $Y=1$. 假定杨算符对应的正则杨表为

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \multicolumn{1}{c}{} \\ \cline{1-1}\end{array}$$

则味道波函数的标准基有两个态

$$\begin{array}{|c|c|}\hline u & u \\ \hline d & \multicolumn{1}{c}{} \\ \cline{1-1}\end{array} = 2uud-duu-udu\ , \qquad (23)\begin{array}{|c|c|}\hline u & u \\ \hline d & \multicolumn{1}{c}{} \\ \cline{1-1}\end{array} = 2udu-duu-uud$$

自旋波函数的标准基也有两个态

$$\begin{array}{|c|c|}\hline + & - \\ \hline - & \multicolumn{1}{c}{} \\ \cline{1-1}\end{array} = (+--)+(-+-)-2(--+),$$

$$(23)\begin{array}{|c|c|}\hline + & - \\ \hline - & \multicolumn{1}{c}{} \\ \cline{1-1}\end{array} = (+--)+(--+)-2(-+-)$$

在这组标准基中, 置换群生成元的表示矩阵已在表 6.4 中算出 [见式 (6.114)]

$$D^{[2,1]}[(1\ 2)]=\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad D^{[2,1]}[(1\ 2\ 3)]=\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

各自直乘后, 找本征值为 1 的共同本征矢量

$$D^{[2,1]}[(1\ 2)]\times D^{[2,1]}[(1\ 2)]=\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$D^{[2,1]}[(1\ 2\ 3)]\times D^{[2,1]}[(1\ 2\ 3)]=\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

每个矩阵有两个本征值为 1 的本征矢量, 它们分别是

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} \qquad 和 \qquad \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

本征值为 1 的共同本征矢量取转置后为 (2, 1, 1, 2). 因此质子波函数为

$$
\begin{aligned}
\mathrm{P}_{1/2} &= \begin{array}{|c|c|}\hline \mathrm{u} & \mathrm{u} \\ \hline \mathrm{d} \\ \cline{1-1}\end{array} \left\{ 2 \begin{array}{|c|c|}\hline + & - \\ \hline - \\ \cline{1-1}\end{array} + \left[(2\ 3) \begin{array}{|c|c|}\hline + & - \\ \hline - \\ \cline{1-1}\end{array} \right] \right\} \\
&\quad + \left[(2\ 3) \begin{array}{|c|c|}\hline \mathrm{u} & \mathrm{u} \\ \hline \mathrm{d} \\ \cline{1-1}\end{array} \right] \left\{ \begin{array}{|c|c|}\hline + & - \\ \hline - \\ \cline{1-1}\end{array} + 2 \left[(2\ 3) \begin{array}{|c|c|}\hline + & - \\ \hline - \\ \cline{1-1}\end{array} \right] \right\} \\
&= \{2uud - duu - udu\} \cdot 3\{(+--) - (--+)\} \\
&\quad + \{2udu - duu - uud\} \cdot 3\{(+--) - (-+-)\} \\
&= 3\{u_+u_-d_- - 2d_+u_-u_- + u_+d_-u_- - 2u_-u_-d_+ + d_-u_-u_+ \\
&\quad + u_-d_-u_+ + u_-u_+d_- + d_-u_+u_- - 2u_-d_+u_-\}
\end{aligned}
\tag{8.95}
$$

为了归一化, 可把前面的常数换成 $\sqrt{1/18}$. 容易检验, 式 (8.95) 对任意两夸克交换是对称的, 交换反对称的性质由颜色波函数提供.

习　题

1. 计算 SU(3) 群和 SU(6) 群用下列杨图标记的不可约表示的维数: $[3]$, $[2,1]$, $[3,3]$, $[4,2]$, $[5,1]$.

2. 对 SU(3) 群和 SU(6) 群, 分别计算下列表示直乘分解的克莱布施 – 戈登级数, 并用维数公式检验: (1) $[2,1]\times[3,0]$,　(2) $[3,0]\times[3,0]$,　(3) $[3,0]\times[3,3]$,　(4) $[4,2]\times[2,1]$.

3. 把下面 SU(6) 群的无迹混合张量表示变换成协变张量或逆变张量表示, 并计算这些表示的维数: (1) $[3,2,1]^*$,　(2) $[3,2,1]\backslash[3,3]^*$,　(3) $[4,3,1]\backslash[3,2]^*$.

4. 画出 SU(3) 群的不可约表示 [4] 的方块权图, 对每一个权, 标上相应的正交归一的正则张量杨表.

5. 画出 SU(3) 群的不可约表示 $[3,1]$ 的方块权图, 对每一个权, 标上相应的正交归一的正则张量杨表.

6. 画出 SU(3) 群的不可约表示 $[2,1,1]$ 的平面权图, 对每一个权, 标上相应的正交归一的正则张量杨表.

7. 计算 SU(3) 群直乘表示 $[2]\times[1]$ 的克莱布施 – 戈登级数和克莱布施 – 戈登系数.

8. 中子由一个 u 夸克和两个 d 夸克组成, 试写出 $S_3=-1/2$ 的中子满足费米统计的波函数形式 (设轨道角动量为零, 颜色部分不必明显写出).

9. 按下列步骤证明

$$
\sum_{A=1}^{N^2-1} (T_A)_{ac}(T_A)_{bd} = \frac{1}{2}\delta_a^d\delta_b^c - \frac{1}{2N}\delta_a^c\delta_b^d
$$

其中, $(T_A)_{ac}$ 是 SU(N) 群自身表示的生成元.

(1) SU(N) 群不变的 (2 2) 阶混合张量 T_{ab}^{cd} 只能是 $\delta_a^c\delta_b^d$ 和 $\delta_a^d\delta_b^c$ 的线性组合.

(2) 定义 SU(N) 群 (2 2) 阶混合张量

$$T_{ab}^{cd} \equiv \sum_{A=1}^{N^2-1} (T_A)_{ac} (T_A)_{bd}$$

证明它在 SU(N) 变换中保持不变.

(3) 把 T_{ab}^{cd} 按 δ 函数展开, 确定组合系数, 最后证明上式.

*第九章　SO(N) 群

本章主要研究 SO(N) 群的张量表示, 旋量表示和洛伦兹群的不可约表示.

9.1　SO(N) 群的张量表示

本节讨论 SO(N) 群张量空间的约化, 并计算 SO(N) 群的不可约张量基. 张量表示是 SO(N) 群的单值表示.

一、SO(N) 群的张量

与 SU(N) 群的张量和张量基的概念相类似, SO(N) 群的 n 阶张量 $\boldsymbol{T}_{a_1\cdots a_n}$ 有 n 个指标, N^n 个分量, 在 SO(N) 变换 R 中按下式变换

$$\boldsymbol{T}_{a_1\cdots a_n} \xrightarrow{R} (O_R\boldsymbol{T})_{a_1\cdots a_n} = \sum_{b_1\cdots b_n} R_{a_1b_1}\cdots R_{a_nb_n}\boldsymbol{T}_{b_1\cdots b_n} \tag{9.1}$$

同样可以引入张量基的概念. 张量基是只有一个分量不为 0 (等于 1) 的张量, 任何张量可按张量基展开

$$(\boldsymbol{\Theta}_{d_1\cdots d_n})_{a_1\cdots a_n} = \delta_{d_1a_1}\delta_{d_2a_2}\cdots\delta_{d_na_n} = (\boldsymbol{\Theta}_{d_1})_{a_1}(\boldsymbol{\Theta}_{d_2})_{a_2}\cdots(\boldsymbol{\Theta}_{d_n})_{a_n} \tag{9.2}$$

$$\boldsymbol{T}_{a_1\cdots a_n} = \sum_{d_1\cdots d_n} T_{d_1\cdots d_n}(\boldsymbol{\Theta}_{d_1\cdots d_n})_{a_1\cdots a_n} = T_{a_1\cdots a_n} \tag{9.3}$$

在 SO(N) 变换中张量基做如下变换

$$O_R\boldsymbol{\Theta}_{d_1\cdots d_n} = \sum_{b_1\cdots b_n}\boldsymbol{\Theta}_{b_1\cdots b_n}R_{b_1d_1}\cdots R_{a_nd_n} \tag{9.4}$$

在置换变换中, 张量和张量基也按式 (8.6) 和 (8.19) 变换. SO(N) 群的 n 阶张量的集合构成 N^n 维张量空间, 它是一个线性空间, 并对 SO(N) 变换和张量指标间的置换变换保持不变. 对 SO(N) 群张量, 外尔互反性也同样成立, 即置换变换和 SO(N) 变换的次序可以交换, 因而张量空间也可以用杨算符投影的方法, 分解为对 SO(N) 变换不变的张量子空间的直和.

与 SU(N) 情况不同之处在于变换矩阵变成了实正交矩阵 $R\in$ SO(N), 这使 SO(N) 群张量产生若干新的性质. 首先, 在 SO(N) 变换中, 张量分量的实部和虚部都独立地按照式 (9.1) 做变换, 分别构成 SO(N) 群的张量, 因而对 SO(N) 群可以只研究实张量. 第二, 由于 R 是实矩阵, SO(N) 群的协变张量和逆变张量完全相同. 以前在两类张量指标之间的取迹运算 (收缩), 现在在同类张量指标间进行, 迹张量

子空间和无迹张量子空间分别对 SO(N) 变换保持不变. 在用杨算符投影的方法分解张量空间之前, 先要把张量空间分解为一系列无迹张量子空间的直和. 第三, 设 $\mathcal{T}$ 是 SO(N) 群的 n 阶无迹张量集合构成的张量空间, 用杨算符投影后得到指标具有确定对称性的无迹张量子空间 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\mathcal{T}=\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$, 如果杨图 $[\lambda]$ 前两列格数之和大于 N, 由于无迹条件数目大于独立张量分量数目, 无迹张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 是空集 [参看式 (8.58) 的证明]. 第四, 当杨图第一列格数 τ 大于 $N/2$ 时, 张量基可通过 N 阶完全反对称张量 $\epsilon_{a_1\cdots a_N}$ 组合, 化为对偶张量基, 对应表示的杨图第一列格数由 τ 改为 $N-\tau$, 即

$$[\lambda']\simeq[\lambda],\qquad \lambda'_j=\begin{cases}\lambda_j, & j\leqslant N-\tau,\\ 0, & j>N-\tau,\end{cases}\qquad N/2<\tau<N \tag{9.5}$$

这样两个杨图称为对偶杨图, 它们对应的表示等价.

为了说清楚对偶张量基的概念, 我们以反对称张量作为例子做进一步解释. 当 $[\lambda]=[1^\tau]$ 是一列的杨图时, 张量基 $\mathcal{Y}^{[1^\tau]}\Theta_{a_1\cdots a_\tau}$ 的对偶张量基定义为

$$^*\left[\mathcal{Y}^{[1^\tau]}\Theta\right]_{a_1\cdots a_{N-\tau}}=\frac{1}{\tau!}\sum_{a_{N-\tau+1}\cdots a_N}\epsilon_{a_1\cdots a_{N-\tau}a_{N-\tau+1}\cdots a_N}\mathcal{Y}^{[1^\tau]}\Theta_{a_N\cdots a_{N-\tau+1}} \tag{9.6}$$

逆变换有

$$\begin{aligned}&\frac{1}{(N-\tau)!}\sum_{a_{\tau+1}\cdots a_N}\epsilon_{b_1\cdots b_\tau a_{\tau+1}\cdots a_N}\ ^*\left[\mathcal{Y}^{[1^\tau]}\Theta\right]_{a_N\cdots a_{\tau+1}}\\ &=\frac{1}{\tau!(N-\tau)!}\sum_{a_1\cdots a_N}\epsilon_{b_1\cdots b_\tau a_{\tau+1}\cdots a_N}\epsilon_{a_N\cdots a_{\tau+1}a_\tau\cdots a_1}\mathcal{Y}^{[1^\tau]}\Theta_{a_1\cdots a_\tau}\\ &=(-1)^{N(N-1)/2}\mathcal{Y}^{[1^\tau]}\Theta_{b_1\cdots b_\tau}\end{aligned} \tag{9.7}$$

式中, 两个 N 阶完全反对称张量相乘时, 先把第二个完全反对称张量的指标逆序排列, 产生因子 $(-1)^{N(N-1)/2}$, 然后指标求和, 消去前面的分母, 并产生 $N-\tau$ 个 δ 函数的乘积之和, 得到最后结果. 实际上, 把因反对称指标求和产生的重复项与 $\tau!$ 消去后, 式 (9.6) 的求和中只包含一项不为零. 除了符号外, 两组张量基只是排列次序上的不同. 这是同一线性空间中基的组合, 即相似变换, 因而对应的表示是等价的. 另一方面, 由式 (9.6) 可以证明, 新的基是按照反对称表示 $[1^{N-\tau}]$ 变换的, 证明过程同式 (8.60). 因此 $[1^\tau]\simeq[1^{N-\tau}]$. 参考附录 33 的证明, 由于无迹条件, 这等价关系可以推广到任意 τ 行杨图 $[\lambda]$ 的情况, 即式 (9.5).

第五, 当 N 是偶数时, 若杨图 $[\lambda]$ 的行数等于 $\ell=N/2$, 则杨图 $[\lambda]$ 与其对偶杨图完全相同, 称为自对偶杨图. 为了使张量基在取两次对偶后恢复原状, 在对偶关

系式 (9.6) 中引入因子 $(-\mathrm{i})^\ell$, 以消去式 (9.7) 中的因子 $(-1)^{N(N-1)/2} = (-1)^\ell$

$$\begin{aligned} {}^*\left[\mathcal{Y}^{[\lambda]}\Theta\right]_{a_1\cdots a_\ell b\cdots} &= \frac{(-\mathrm{i})^\ell}{\ell!} \sum_{a_{\ell+1}\cdots a_{2\ell}} \epsilon_{a_1\cdots a_\ell a_{\ell+1}\cdots a_{2\ell}} \mathcal{Y}^{[\lambda]}\Theta_{a_{2\ell}\cdots a_{\ell+1}b\cdots}, \\ \mathcal{Y}^{[\lambda]}\Theta_{a_1\cdots a_\ell b\cdots} &= \frac{(-\mathrm{i})^\ell}{\ell!} \sum_{a_{\ell+1}\cdots a_{2\ell}} \epsilon_{a_1\cdots a_\ell a_{\ell+1}\cdots a_{2\ell}}\, {}^*\left[\mathcal{Y}^{[\lambda]}\Theta\right]_{a_{2\ell}\cdots a_{\ell+1}b\cdots} \end{aligned} \tag{9.8}$$

式中张量杨表, 指标 a_j 填在第一列. 把两组基相加或相减

$$\Psi^{\pm}_{a_1\cdots a_\ell b\cdots} = \frac{1}{2}\left\{\mathcal{Y}^{[\lambda]}\Theta_{a_1\cdots a_\ell b\cdots} \pm {}^*\left[\mathcal{Y}^{[\lambda]}\Theta\right]_{a_1\cdots a_\ell b\cdots}\right\} \tag{9.9}$$

$\Psi^{+}_{a_1\cdots a_\ell b\cdots}$ 在对偶运算中保持不变, 称为自对偶张量基, $\Psi^{-}_{a_1\cdots a_\ell b\cdots}$ 在对偶运算中只改变符号, 称为反自对偶张量基. 例如

$$\Psi^{\pm}_{1\cdots\ell} = \frac{1}{2}\left\{\mathcal{Y}^{[1^\ell]}\Theta_{1\cdots\ell} \pm (-\mathrm{i})^\ell \mathcal{Y}^{[1^\ell]}\Theta_{(2\ell)\cdots(\ell+1)}\right\} \tag{9.10}$$

为了给读者一个直观的概念, 我们取 $N = 4$ $(\ell = 2)$, 把对偶和反对偶张量基具体写出来. 注意, ${}^*\left[\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta\right]_{ab} = -{}^*\left[\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta\right]_{ba}$ 和 $\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{ab} = -\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{ba}$.

$$\begin{aligned} &{}^*\left[\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta\right]_{12} = \mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{34}, \quad {}^*\left[\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta\right]_{13} = \mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{42}, \quad {}^*\left[\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta\right]_{14} = \mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{23}, \\ &{}^*\left[\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta\right]_{34} = \mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{12}, \quad {}^*\left[\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta\right]_{24} = \mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{31}, \quad {}^*\left[\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta\right]_{23} = \mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{14} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi^{\pm}_{12} &= \pm\Psi^{\pm}_{34} = \frac{1}{2}\left\{\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{12} \pm \mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{34}\right\}, \\ \Psi^{\pm}_{13} &= \pm\Psi^{\pm}_{42} = \frac{1}{2}\left\{\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{13} \pm \mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{42}\right\}, \\ \Psi^{\pm}_{14} &= \pm\Psi^{\pm}_{23} = \frac{1}{2}\left\{\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{14} \pm \mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{23}\right\} \end{aligned} \tag{9.11}$$

张量的自对偶性质在 SO(N) 变换中保持不变. 因此, 当 $N = 2\ell$ 和杨图 $[\lambda]$ 行数为 ℓ 时, 即 $[\lambda]$ 是自对偶杨图, 无迹张量空间 $\mathcal{Y}^{[\lambda]}\mathcal{T}$ 分解为两个维数相同的不变张量子空间的直和, 分别对应 SO(N) 群两个不等价的不可约表示, 记作 $[(S)\lambda]$ 和 $[(A)\lambda]$. 两个张量子空间分别称为自对偶和反自对偶张量子空间. 注意, 杨算符对张量基的组合, 和式 (9.6) 的对偶张量基的组合, 都是实组合, 式 (9.9) 引入的对偶张量基的组合, 当 N 能被 4 除尽时也是实组合, 唯有当 $N = 4m + 2$ 时, 式 (9.9) 引入的对偶张量基的组合是复组合.

总之, 首先把 SO(N) 群的 n 阶张量空间, 分解为一系列无迹张量子空间的直和, 它们的张量阶数分别为 n, $n-2$, $n-4$ 等. 然后对无迹张量空间用杨算符投影, 得到张量指标有确定对称性的无迹张量子空间, 对应的表示用杨图标记. 当杨图行数小于 $N/2$ 时, 这表示是不可约实表示. 当杨图前两列格数之和大于 N 时, 这子

空间是零空间. 当杨图行数大于 $N/2$ 时, 这表示等价于对偶杨图标记的表示 [见式 (9.5)]. 对 $SO(2\ell)$ 群, 当杨图 $[\lambda]$ 行数等于 ℓ 时, 这张量子空间又分解为自对偶和反自对偶两个张量子空间的直和, 分别对应自对偶表示 $[(S)\lambda]$ 和反自对偶表示 $[(A)\lambda]$. 当 $N=4m+2$ 时, $[(S)\lambda]$ 和 $[(A)\lambda]$ 是互为复共轭的不等价不可约表示. 当 $N=4m$ 时, $[(S)\lambda]$ 和 $[(A)\lambda]$ 是两个互不等价的不可约实表示. 所有张量表示都是 SO(N) 群的单值表示. 关于表示的等价性和不可约性的结论将在下两小节证明.

计算 SO(N) 群的不可约张量基有几个困难. 一是这样的正则张量杨表不是谢瓦莱基 H_μ 的共同本征张量基. 二是张量基的无迹化虽不是原则性的困难, 但是计算很麻烦, 而且不好写成统一的形式. 三是即使张量基无迹化了, 用杨算符投影后得到的正则张量杨表不一定线性无关. 解决的方法是重新定义一组正交归一的矢量基, 称为球谐基. 下面将就 N 为奇数和偶数两种情况分别讨论.

二、SO(2ℓ+1) 群的谢瓦莱基和不可约张量表示最高权

第七章已经讨论过 SO(N) 群的生成元及其对易关系, 根与素根, 和 SO(N) 群对应的李代数. 在自身表示中 SO(N) 群的生成元取为 T_{ab}, 满足对易关系

$$\begin{aligned}
&(T_{ab})_{cd}=-\mathrm{i}\left\{\delta_{ac}\delta_{bd}-\delta_{ad}\delta_{bc}\right\} ,\\
&[T_{ab},\ T_{cd}]=-\mathrm{i}\left\{\delta_{bc}T_{ad}+\delta_{ad}T_{bc}-\delta_{bd}T_{ac}-\delta_{ac}T_{bd}\right\}
\end{aligned} \tag{9.12}$$

对 $SO(2\ell+1)$ 群, 嘉当子代数的基 H_j 为

$$H_j=T_{(2j-1)(2j)},\qquad 1\leqslant j\leqslant \ell \tag{9.13}$$

素根为

$$\boldsymbol{r}_\mu=\boldsymbol{e}_\mu-\boldsymbol{e}_{\mu+1},\qquad 1\leqslant\mu<\ell,\qquad \boldsymbol{r}_\ell=\boldsymbol{e}_\ell \tag{9.14}$$

$\boldsymbol{r}_\mu$ 是长根, $d_\mu=1$, $\boldsymbol{r}_\ell$ 是短根, $d_\ell=1/2$. $SO(2\ell+1)$ 群对应的李代数是 B_ℓ. 按照谢瓦莱基的定义式 (7.149), $SO(2\ell+1)$ 群自身表示生成元的谢瓦莱基为

$$\begin{aligned}
H_\mu &= T_{(2\mu-1)(2\mu)}-T_{(2\mu+1)(2\mu+2)},\\
E_\mu &= \frac{1}{2}\left\{T_{(2\mu)(2\mu+1)}-\mathrm{i}T_{(2\mu-1)(2\mu+1)}-\mathrm{i}T_{(2\mu)(2\mu+2)}-T_{(2\mu-1)(2\mu+2)}\right\},\\
F_\mu &= \frac{1}{2}\left\{T_{(2\mu)(2\mu+1)}+\mathrm{i}T_{(2\mu-1)(2\mu+1)}+\mathrm{i}T_{(2\mu)(2\mu+2)}-T_{(2\mu-1)(2\mu+2)}\right\},\\
H_\ell &= 2T_{(2\ell-1)(2\ell)},\\
E_\ell &= T_{(2\ell)(2\ell+1)}-\mathrm{i}T_{(2\ell-1)(2\ell+1)},\\
F_\ell &= T_{(2\ell)(2\ell+1)}+\mathrm{i}T_{(2\ell-1)(2\ell+1)}
\end{aligned} \tag{9.15}$$

其中, $1\leqslant\mu\leqslant\ell-1$. 矢量基 $\boldsymbol{\Theta}_a$ 不是谢瓦莱基 H_μ 的共同本征矢量. 把第四章 SO(3) 群的球谐基推广

$$\boldsymbol{\Phi}_1=-\sqrt{1/2}\,(\boldsymbol{\Theta}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_2),\qquad \boldsymbol{\Phi}_0=\boldsymbol{\Theta}_3,\qquad \boldsymbol{\Phi}_{-1}=\sqrt{1/2}\,(\boldsymbol{\Theta}_1-\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_2)$$

引入 SO$(2\ell+1)$ 群的球谐基 $\mathbf{\Phi}_\alpha$, $1\leqslant\alpha\leqslant 2\ell+1$

$$\mathbf{\Phi}_\alpha=\begin{cases}(-1)^{\ell-\alpha+1}\sqrt{1/2}\left(\mathbf{\Theta}_{2\alpha-1}+\mathrm{i}\mathbf{\Theta}_{2\alpha}\right), & 1\leqslant\alpha\leqslant\ell\\ \mathbf{\Theta}_{2\ell+1}, & \alpha=\ell+1\\ \sqrt{1/2}\left(\mathbf{\Theta}_{4\ell-2\alpha+3}-\mathrm{i}\mathbf{\Theta}_{4\ell-2\alpha+4}\right), & \ell+2\leqslant\alpha\leqslant 2\ell+1\end{cases}\tag{9.16}$$

n 阶张量的张量基 $\mathbf{\Phi}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}$ 是它们的直乘 $\mathbf{\Phi}_{\alpha_1}\cdots\mathbf{\Phi}_{\alpha_n}$. 在球谐基 $\mathbf{\Phi}_\alpha$ 中谢瓦莱基的非零矩阵元为

$$\begin{aligned}
&H_\mu\mathbf{\Phi}_\mu=\mathbf{\Phi}_\mu, && H_\mu\mathbf{\Phi}_{\mu+1}=-\mathbf{\Phi}_{\mu+1}\\
&H_\mu\mathbf{\Phi}_{2\ell-\mu+1}=\mathbf{\Phi}_{2\ell-\mu+1}, && H_\mu\mathbf{\Phi}_{2\ell-\mu+2}=-\mathbf{\Phi}_{2\ell-\mu+2}\\
&H_\ell\mathbf{\Phi}_\ell=2\mathbf{\Phi}_\ell, && H_\ell\mathbf{\Phi}_{\ell+2}=-2\mathbf{\Phi}_{\ell+2}\\
&E_\mu\mathbf{\Phi}_{\mu+1}=\mathbf{\Phi}_\mu, && E_\mu\mathbf{\Phi}_{2\ell-\mu+2}=\mathbf{\Phi}_{2\ell-\mu+1}\\
&E_\ell\mathbf{\Phi}_{\ell+1}=\sqrt{2}\mathbf{\Phi}_\ell, && E_\ell\mathbf{\Phi}_{\ell+2}=\sqrt{2}\mathbf{\Phi}_{\ell+1}\\
&F_\mu\mathbf{\Phi}_\mu=\mathbf{\Phi}_{\mu+1}, && F_\mu\mathbf{\Phi}_{2\ell-\mu+1}=\mathbf{\Phi}_{2\ell-\mu+2}\\
&F_\ell\mathbf{\Phi}_\ell=\sqrt{2}\mathbf{\Phi}_{\ell+1}, && F_\ell\mathbf{\Phi}_{\ell+1}=\sqrt{2}\mathbf{\Phi}_{\ell+2}
\end{aligned}\tag{9.17}$$

其中, $1\leqslant\mu\leqslant\ell-1$. 为了直观, 明显写出 H_μ 在球谐基中的矩阵形式

$$\begin{aligned}
H_\mu &= \mathrm{diag}\{\underbrace{0,\cdots,0}_{\mu-1},1,-1,\underbrace{0,\cdots,0}_{2\ell-2\mu-1},1,-1,\underbrace{0,\cdots,0}_{\mu-1}\}\\
H_\ell &= \mathrm{diag}\{\underbrace{0,\cdots,0}_{\ell-1},\ 2,0,-2,\underbrace{0,\cdots,0}_{\ell-1}\}
\end{aligned}$$

采用球谐基后, SO$(2\ell+1)$ 群的张量杨表又变成 H_μ 的共同本征状态. 根据在升算符 E_μ 作用下得零的要求, 表示 $[\lambda]$ 最高权态对应的正则张量杨表 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\mathbf{\Phi}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}$, 所有格子都填以该格子所在行数. 根据球谐基的具体形式, 这样的正则张量杨表不包含 $\alpha>\ell$ 的球谐基 $\mathbf{\Phi}_\alpha$, 因而是无迹的. 例如, $\mathbf{\Theta}_1\mathbf{\Theta}_1$ 是有迹的, 但 $\mathbf{\Phi}_1\mathbf{\Phi}_1$ 是无迹的. 与 SU(N) 群的证明一样, 可证在用杨图 $[\lambda]$ 标记的无迹张量子空间中, 只有这一个正则张量杨表在所有升算符作用下为零, 可见这张量子空间对应不可约表示. 由式 (9.17), SO$(2\ell+1)$ 群杨图 $[\lambda]$ 和最高权 M 的关系为

$$M_\mu=\lambda_\mu-\lambda_{\mu+1},\qquad 1\leqslant\mu<\ell,\qquad M_\ell=2\lambda_\ell\tag{9.18}$$

SO$(2\ell+1)$ 群表示 $[\lambda]$ 中的其他状态基可按照方块权图, 由最高权态用降算符作用得到. 升算符或降算符的作用只是使状态基在不可约张量子空间内变化. 由于最高权态是无迹的, 由最高权态降下来的所有状态基也一定是无迹的, 而且自动是正交归一的. 式 (9.18) 指出, 对于行数不大于 ℓ 的杨图, 不同杨图描写不等价的不可约表

示. SO($2\ell+1$) 群张量表示 $[\lambda]$ 是单值表示, 它的最高权的特点是最后一个分量 M_ℓ 是偶数. 以后会看到, M_ℓ 为奇数的表示是双值表示, 称为旋量表示.

作为例子, 计算 SO(7) 群 (B_3 李代数) 的二阶无迹对称张量, 对应杨图是 $[2,0,0]$, 最高权是 $\boldsymbol{M}=(2,0,0)$. 素根 $\boldsymbol{r}_\mu$ 和基本主权 $\boldsymbol{w}_\mu$ 的关系是

$$\boldsymbol{r}_1=2\boldsymbol{w}_1-\boldsymbol{w}_2,\qquad \boldsymbol{r}_2=-\boldsymbol{w}_1+2\boldsymbol{w}_2-2\boldsymbol{w}_3,\qquad \boldsymbol{r}_3=-\boldsymbol{w}_2+2\boldsymbol{w}_3$$

用球谐基表出的正则张量杨表为

$$\boxed{a\,|\,b}=\boldsymbol{\Phi}_{ab}+\boldsymbol{\Phi}_{ba},\qquad \boxed{a\,|\,a}=2\boldsymbol{\Phi}_{aa}$$

由正则张量杨表构成的迹张量为

$$\begin{aligned}
&-\boxed{1\,|\,7}+\boxed{2\,|\,6}-\boxed{3\,|\,5}+\frac{1}{2}\boxed{4\,|\,4}\\
&=-\boldsymbol{\Phi}_{17}-\boldsymbol{\Phi}_{71}+\boldsymbol{\Phi}_{26}+\boldsymbol{\Phi}_{62}-\boldsymbol{\Phi}_{35}-\boldsymbol{\Phi}_{53}+\boldsymbol{\Phi}_{44}\\
&=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\Theta}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_2)(\boldsymbol{\Theta}_1-\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_2)+\frac{1}{2}(\boldsymbol{\Theta}_1-\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_2)(\boldsymbol{\Theta}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_2)+\cdots+\boldsymbol{\Theta}_4\boldsymbol{\Theta}_4=\sum_{a=1}^{7}\boldsymbol{\Theta}_{aa}
\end{aligned}\tag{9.19}$$

由最高权态 $|(2,0,0),(2,0,0)\rangle\equiv|(2,0,0)\rangle=\boxed{1\,|\,1}=2\boldsymbol{\Phi}_{11}$ 出发, 用画方块权图的标准方法, 可以算出表示 $(2,0,0)$ 的所有状态基, 算出降算符在这组基中的非零矩阵元素. 下面只给出部分计算. 全部计算结果列于图 9.1.

从最高权态可构造一个 $\mathcal{A}_1$ 三重态

$$\begin{aligned}
&|(0,1,0)\rangle=\sqrt{1/2}F_1\ |(2,0,0)\rangle=\sqrt{1/2}F_1\boxed{1\,|\,1}=\sqrt{2}\boxed{1\,|\,2},\\
&|(\overline{2},2,0)\rangle=\sqrt{1/2}F_1\ |(0,1,0)\rangle=F_1\boxed{1\,|\,2}=\boxed{2\,|\,2}
\end{aligned}$$

主权 $(0,1,0)$ 与最高权同属一个 $\mathcal{A}_1$ 三重态, 因而是单权. 表示 $(2,0,0)$ 包含一个三重权 $(0,0,0)$, 与重权有关的计算如下: 经过若干步计算后, 得

$$\begin{aligned}
&|(2,\overline{1},0)\rangle=F_2\ |(1,1,\overline{2})\rangle=\sqrt{2}F_2\boxed{1\,|\,5}=\sqrt{2}\boxed{1\,|\,6},\\
&|(\overline{1},2,\overline{2})\rangle=F_1\ |(1,1,\overline{2})\rangle=\sqrt{2}F_1\boxed{1\,|\,5}=\sqrt{2}\boxed{2\,|\,5},\\
&|(0,\overline{1},2)\rangle=(1/2)F_3\ |(0,\overline{2},4)\rangle=(1/2)F_3\boxed{3\,|\,3}=\sqrt{2}\boxed{3\,|\,4}
\end{aligned}$$

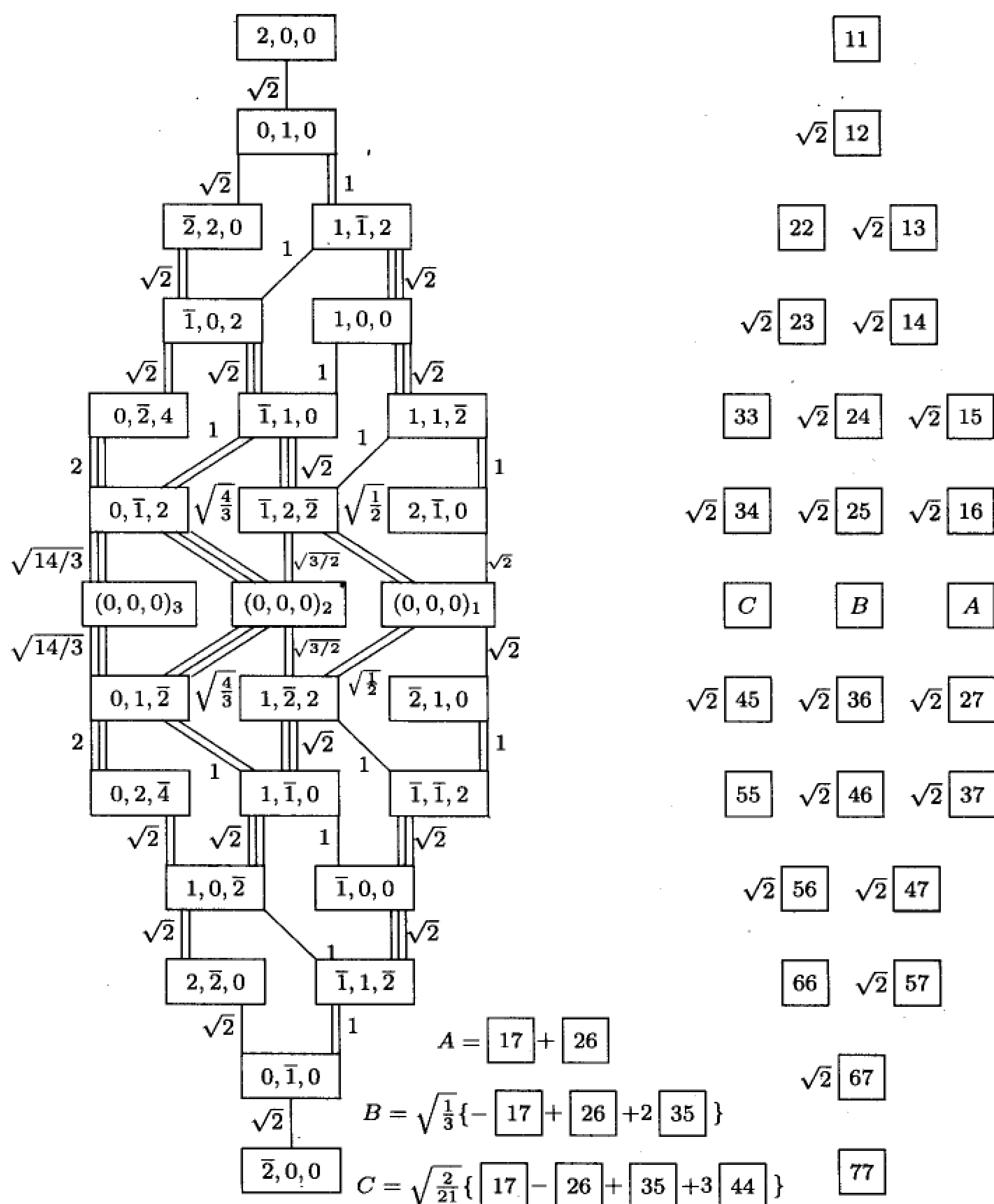


图 9.1　SO(7) 群表示 [2, 0, 0] 的方块权图和张量基

由它们可以分别构造一个 $\mathcal{A}_\mu$ 三重态, 而且三重态中都包含权为 (0, 0, 0) 的态, 因而主权 (0, 0, 0) 可能是三重权. 设 $|(0,0,0)_1\rangle$ 属于 $\mathcal{A}_1$ 三重态, 其他两个属 $\mathcal{A}_1$ 单态, $|(0,0,0)_2\rangle$ 与 $|(0,0,0)_1\rangle$ 适当组合后属于 $\mathcal{A}_2$ 三重态, $|(0,0,0)_3\rangle$ 属 $\mathcal{A}_2$ 单态

$$|(0,0,0)_1\rangle = \sqrt{1/2}F_1\ |(2,\overline{1},0)\rangle = F_1 \boxed{1\ |\ 6} = \boxed{1\ |\ 7} + \boxed{2\ |\ 6}\ ,$$

$$E_1\ |(0,0,0)_2\rangle = E_1\ |(0,0,0)_3\rangle = E_2\ |(0,0,0)_3\rangle = 0\ ,$$

$$F_2\ |(\bar{1},2,\bar{2})\rangle = a_1\ |(0,0,0)_1\rangle + a_2\ |(0,0,0)_2\rangle\ ,$$
$$F_3\ |(0,\bar{1},2)\rangle = b_1\ |(0,0,0)_1\rangle + b_2\ |(0,0,0)_2\rangle + b_3\ |(0,0,0)_3\rangle$$

其中, $a_1^2+a_2^2=2$ 和 $b_1^2+b_2^2+b_3^2=6$. 与式 (9.19) 比较, $|(0,0,0)_1\rangle$ 明显是无迹张量. 用 E_1 作用在后两式上, 得

$$E_1F_2\ |(\bar{1},2,\bar{2})\rangle = \sqrt{2}a_1\ |(2,\bar{1},0)\rangle = F_2E_1\ |(\bar{1},2,\bar{2})\rangle = F_2\ |(1,1,\bar{2})\rangle = \ |(2,\bar{1},0)\rangle\ ,$$
$$E_1F_3\ |(0,\bar{1},2)\rangle = \sqrt{2}b_1\ |(2,\bar{1},0)\rangle = F_3E_1\ |(0,\bar{1},2)\rangle = 0$$

得 $a_1=\sqrt{1/2}$ 和 $b_1=0$. 选择 $|(0,0,0)_2\rangle$ 的位相, 使 a_2 是正实数, 解得 $a_2=\sqrt{2-a_1^2}=\sqrt{3/2}$. 再用 E_2F_3 作用在 $|(0,\bar{1},2)\rangle$ 上

$$E_2F_3\ |(0,\bar{1},2)\rangle = \sqrt{3/2}b_2\ |(\bar{1},2,\bar{2})\rangle = F_3E_2\ |(0,\bar{1},2)\rangle = F_3\ |(\bar{1},1,0)\rangle = \sqrt{2}\ |(\bar{1},2,\bar{2})\rangle$$

解得 $b_2=\sqrt{4/3}$. 选择 $|(0,0,0)_3\rangle$ 的位相, 使 b_3 是正实数, 解得 $b_3=\sqrt{6-b_2^2}=\sqrt{14/3}$. 由此算得后两个零权的状态基为

$$\begin{aligned}
|(0,0,0)_2\rangle &= \sqrt{2/3}\left\{F_2\ |(\bar{1},2,\bar{2})\rangle - \sqrt{1/2}\ |(0,0,0)_1\rangle\right\}\\
&= \sqrt{1/3}\left\{2F_2\ \begin{array}{|c|c|}\hline 2&5\\\hline\end{array} - \begin{array}{|c|c|}\hline 1&7\\\hline\end{array} - \begin{array}{|c|c|}\hline 2&6\\\hline\end{array}\right\}\\
&= \sqrt{1/3}\left\{-\begin{array}{|c|c|}\hline 1&7\\\hline\end{array} + \begin{array}{|c|c|}\hline 2&6\\\hline\end{array} + 2\begin{array}{|c|c|}\hline 3&5\\\hline\end{array}\right\}\ ,\\
|(0,0,0)_3\rangle &= \sqrt{3/14}\left\{F_3\ |(0,\bar{1},2)\rangle - \sqrt{4/3}\ |(0,0,0)_2\rangle\right\}\\
&= \sqrt{2/21}\left\{\sqrt{9/2}F_3\begin{array}{|c|c|}\hline 3&4\\\hline\end{array} + \begin{array}{|c|c|}\hline 1&7\\\hline\end{array} - \begin{array}{|c|c|}\hline 2&6\\\hline\end{array} - 2\begin{array}{|c|c|}\hline 3&5\\\hline\end{array}\right\}\\
&= \sqrt{2/21}\left\{\begin{array}{|c|c|}\hline 1&7\\\hline\end{array} - \begin{array}{|c|c|}\hline 2&6\\\hline\end{array} + \begin{array}{|c|c|}\hline 3&5\\\hline\end{array} + 3\begin{array}{|c|c|}\hline 4&4\\\hline\end{array}\right\}
\end{aligned}$$

与式 (9.19) 比较知, 它们确都是无迹张量.

三、SO(2ℓ) 群的谢瓦莱基和不可约张量表示最高权

对 SO(2ℓ) 群, 嘉当子代数的基 H_j 仍为式 (9.13), 素根为

$$\boldsymbol{r}_\mu = \boldsymbol{e}_\mu - \boldsymbol{e}_{\mu+1}, \qquad 1\leqslant\mu<\ell, \qquad \boldsymbol{r}_\ell = \boldsymbol{e}_{\ell-1}+\boldsymbol{e}_\ell \tag{9.20}$$

全部素根长度相同, $d_\mu=1$, SO(2ℓ) 群对应的李代数是 D_ℓ. 按照谢瓦莱基的定义式 (7.149), SO(2ℓ) 群自身表示生成元的谢瓦莱基, 当 $1\leqslant\mu<\ell$ 时与 SO($2\ell+1$) 群相同, 仍由式 (9.15) 给出, 但当 $\mu=\ell$ 时为

$$\begin{aligned}
H_\ell &= T_{(2\ell-3)(2\ell-2)} + T_{(2\ell-1)(2\ell)},\\
E_\ell &= \frac{1}{2}\left\{T_{(2\ell-2)(2\ell-1)} - \mathrm{i}T_{(2\ell-3)(2\ell-1)} + \mathrm{i}T_{(2\ell-2)(2\ell)} + T_{(2\ell-3)(2\ell)}\right\},\\
F_\ell &= \frac{1}{2}\left\{T_{(2\ell-2)(2\ell-1)} + \mathrm{i}T_{(2\ell-3)(2\ell-1)} - \mathrm{i}T_{(2\ell-2)(2\ell)} + T_{(2\ell-3)(2\ell)}\right\}
\end{aligned}\tag{9.21}$$

正则张量杨表也不是谢瓦莱基 H_μ 的共同本征张量基. 对 SO(2ℓ) 群, 类似地定义球谐基 $\boldsymbol{\Phi}_\alpha$

$$\boldsymbol{\Phi}_\alpha = \begin{cases} (-1)^{\ell-\alpha}\sqrt{1/2}\,(\boldsymbol{\Theta}_{2\alpha-1} + \mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_{2\alpha}), & 1 \leqslant \alpha \leqslant \ell \\ \sqrt{1/2}\,(\boldsymbol{\Theta}_{4\ell-2\alpha+1} - \mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_{4\ell-2\alpha+2}), & \ell+1 \leqslant \alpha \leqslant 2\ell \end{cases} \tag{9.22}$$

n 阶张量的张量基 $\boldsymbol{\Phi}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}$ 是它们的直乘 $\boldsymbol{\Phi}_{\alpha_1}\cdots\boldsymbol{\Phi}_{\alpha_n}$. 在球谐基 $\boldsymbol{\Phi}_\alpha$ 中谢瓦莱基的非零矩阵元为

$$\begin{aligned}
&H_\mu\boldsymbol{\Phi}_\mu = \boldsymbol{\Phi}_\mu, && H_\mu\boldsymbol{\Phi}_{\mu+1} = -\boldsymbol{\Phi}_{\mu+1},\\
&H_\mu\boldsymbol{\Phi}_{2\ell-\mu} = \boldsymbol{\Phi}_{2\ell-\mu}, && H_\mu\boldsymbol{\Phi}_{2\ell-\mu+1} = -\boldsymbol{\Phi}_{2\ell-\mu+1},\\
&H_\ell\boldsymbol{\Phi}_{\ell-1} = \boldsymbol{\Phi}_{\ell-1}, && H_\ell\boldsymbol{\Phi}_\ell = \boldsymbol{\Phi}_\ell,\\
&H_\ell\boldsymbol{\Phi}_{\ell+1} = -\boldsymbol{\Phi}_{\ell+1}, && H_\ell\boldsymbol{\Phi}_{\ell+2} = -\boldsymbol{\Phi}_{\ell+2},\\
&E_\mu\boldsymbol{\Phi}_{\mu+1} = \boldsymbol{\Phi}_\mu, && E_\mu\boldsymbol{\Phi}_{2\ell-\mu+1} = \boldsymbol{\Phi}_{2\ell-\mu},\\
&E_\ell\boldsymbol{\Phi}_{\ell+1} = \boldsymbol{\Phi}_{\ell-1}, && E_\ell\boldsymbol{\Phi}_{\ell+2} = \boldsymbol{\Phi}_\ell,\\
&F_\mu\boldsymbol{\Phi}_\mu = \boldsymbol{\Phi}_{\mu+1}, && F_\mu\boldsymbol{\Phi}_{2\ell-\mu} = \boldsymbol{\Phi}_{2\ell-\mu+1},\\
&F_\ell\boldsymbol{\Phi}_{\ell-1} = \boldsymbol{\Phi}_{\ell+1}, && F_\ell\boldsymbol{\Phi}_\ell = \boldsymbol{\Phi}_{\ell+2}
\end{aligned} \tag{9.23}$$

其中, $1 \leqslant \mu \leqslant \ell-1$. 为了直观, 明显写出 H_μ 在球谐基中的矩阵形式

$$\begin{aligned}
H_\mu &= \mathrm{diag}\{\underbrace{0,\cdots,0}_{\mu-1},1,-1,\underbrace{0,\cdots,0}_{2\ell-2\mu-2},1,-1,\underbrace{0,\cdots,0}_{\mu-1}\},\\
H_\ell &= \mathrm{diag}\{\underbrace{0,\cdots,0}_{\ell-2},1,1,-1,-1,\underbrace{0,\cdots,0}_{\ell-2}\}
\end{aligned}$$

采用球谐基后, 根据在升算符 E_μ 作用下得零的要求, 表示 $[\lambda]$ 最高权态对应的正则张量杨表 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\boldsymbol{\Phi}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}$ 仍是各行格子填以所在行数, 但当杨图行数等于 ℓ 时, 第 ℓ 行的格子, 对自对偶表示 $[(S)\lambda]$ 填以 ℓ, 对反自对偶表示 $[(A)\lambda]$ 填以 $\ell+1$. 由式 (9.23) 可以确认它们在每一个升算符 E_μ 作用下都得零. 因为在最高权态中不同时包含因子 $\boldsymbol{\Phi}_\alpha$ 和 $\boldsymbol{\Phi}_{2\ell-\alpha+1}$, 所以仍是无迹张量. 可证在用杨图 $[\lambda]$ 标记的无迹张量子空间中, 只有这一个正则张量杨表在所有升算符作用下为零, 可见这张量子空间对应不可约表示. SO(2ℓ) 群杨图 $[\lambda]$ 和最高权 $\boldsymbol{M}$ 的关系为

$$\begin{aligned}
&M_\mu = \lambda_\mu - \lambda_{\mu+1}, && \text{当}\ \ 1 \leqslant \mu < \ell-1\\
&M_{\ell-1} = M_\ell = \lambda_{\ell-1}, && \text{当}\ \ \lambda_\ell = 0\\
&M_{\ell-1} = \lambda_{\ell-1} - \lambda_\ell,\ \ M_\ell = \lambda_{\ell-1} + \lambda_\ell, && \text{对}\ \ [(S)\lambda]\ \ \text{表示}\\
&M_{\ell-1} = \lambda_{\ell-1} + \lambda_\ell,\ \ M_\ell = \lambda_{\ell-1} - \lambda_\ell, && \text{对}\ \ [(A)\lambda]\ \ \text{表示}
\end{aligned} \tag{9.24}$$

SO(2ℓ) 群表示 $[\lambda]$ 中的其他状态基可按照方块权图, 由最高权态用降算符作用得到, 这样算得的状态基一定是无迹的, 而且自动是正交归一的. 式 (9.24) 指出, 对于行数小于 ℓ 的杨图, 不同杨图描写不等价的不可约表示, 行数等于 ℓ 的杨图, 又分解为两个不等价的不可约表示, 称为自对偶表示 $[(S)\lambda]$ 和反自对偶表示 $[(A)\lambda]$. SO(2ℓ) 群张量表示 $[\lambda]$ 是单值表示, 它的最高权的特点是最后两个分量之和 $M_{\ell-1}+M_\ell$ 是偶数. 以后会看到, $M_{\ell-1}+M_\ell$ 为奇数的表示是双值表示, 称为旋量表示.

这里给出的自对偶表示 $[(S)\lambda]$ 和反自对偶表示 $[(A)\lambda]$ 的定义与式 (9.9) 的定义是一致的. 为了说明这一致性, 我们以 $N=4$ ($\ell=2$) 为例, 计算相应表示的张量基, 并与式 (9.11) 比较. 自对偶表示 $[(S)\lambda]$ 和反自对偶表示 $[(A)\lambda]$ 的最高权态分别为

$$\begin{aligned}
\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline\end{array} &= \mathcal{Y}^{[1,1]}\boldsymbol{\Phi}_{12}=\boldsymbol{\Phi}_{12}-\boldsymbol{\Phi}_{21}\\
&= \frac{1}{2}\{-(\boldsymbol{\Theta}_1+\mathrm{i}\Theta_2)(\boldsymbol{\Theta}_3+\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_4)+(\boldsymbol{\Theta}_3+\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_4)(\boldsymbol{\Theta}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_2)\}\\
&= \frac{1}{2}\left\{-\mathcal{Y}^{[1,1]}\boldsymbol{\Theta}_{13}-\mathrm{i}\mathcal{Y}^{[1,1]}\boldsymbol{\Theta}_{23}-\mathrm{i}\mathcal{Y}^{[1,1]}\boldsymbol{\Theta}_{14}+\mathcal{Y}^{[1,1]}\boldsymbol{\Theta}_{24}\right\}\\
&= -\boldsymbol{\Psi}_{13}^{+}-\mathrm{i}\boldsymbol{\Psi}_{14}^{+},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 3\\\hline\end{array} &= \mathcal{Y}^{[1,1]}\boldsymbol{\Phi}_{13}=\boldsymbol{\Phi}_{13}-\boldsymbol{\Phi}_{31}\\
&= \frac{1}{2}\{-(\boldsymbol{\Theta}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_2)(\boldsymbol{\Theta}_3-\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_4)+(\boldsymbol{\Theta}_3-\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_4)(\boldsymbol{\Theta}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_2)\}\\
&= \frac{1}{2}\left\{-\mathcal{Y}^{[1,1]}\boldsymbol{\Theta}_{13}-\mathrm{i}\mathcal{Y}^{[1,1]}\boldsymbol{\Theta}_{23}+\mathrm{i}\mathcal{Y}^{[1,1]}\boldsymbol{\Theta}_{14}-\mathcal{Y}^{[1,1]}\boldsymbol{\Theta}_{24}\right\}\\
&= -\boldsymbol{\Psi}_{13}^{-}+\mathrm{i}\boldsymbol{\Psi}_{14}^{-}
\end{aligned}\tag{9.25}$$

自对偶表示 $[(S)\lambda]$ 中的三个状态构成 $\mathcal{A}_2$ 子代数的三重态

$$\begin{aligned}
\sqrt{\frac{1}{2}}\,F_2\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline\end{array} &= \sqrt{\frac{1}{2}}\left(\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 4\\\hline\end{array}-\begin{array}{|c|}\hline 2\\\hline 3\\\hline\end{array}\right)=\sqrt{1/2}\,\{\boldsymbol{\Phi}_{14}-\boldsymbol{\Phi}_{41}-\boldsymbol{\Phi}_{23}+\boldsymbol{\Phi}_{32}\}\\
&= \sqrt{1/8}\,\{-(\boldsymbol{\Theta}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_2)(\boldsymbol{\Theta}_1-\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_2)+(\boldsymbol{\Theta}_1-\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_2)(\boldsymbol{\Theta}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_2)\\
&\quad -(\boldsymbol{\Theta}_3+\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_4)(\boldsymbol{\Theta}_3-\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_4)+(\boldsymbol{\Theta}_3-\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_4)(\boldsymbol{\Theta}_3+\mathrm{i}\boldsymbol{\Theta}_4)\}\\
&= \mathrm{i}\sqrt{1/2}\,\{\mathcal{Y}^{[1,1]}\boldsymbol{\Theta}_{12}+\mathcal{Y}^{[1,1]}\boldsymbol{\Theta}_{34}\}=\mathrm{i}\sqrt{2}\boldsymbol{\Psi}_{12}^{+},
\end{aligned}$$

$$\sqrt{\frac{1}{2}}\,F_2\,\left\{\sqrt{\frac{1}{2}}\left(\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 4\\\hline\end{array}-\begin{array}{|c|}\hline 2\\\hline 3\\\hline\end{array}\right)\right\}=\begin{array}{|c|}\hline 3\\\hline 4\\\hline\end{array}=\boldsymbol{\Phi}_{34}-\boldsymbol{\Phi}_{43}$$

$$= (1/2)\left\{(\Theta_3 - i\Theta_4)(\Theta_1 - i\Theta_2) - (\Theta_1 - i\Theta_2)(\Theta_3 - i\Theta_4)\right\}$$

$$= (1/2)\left\{\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{31} - i\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{41} - i\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{32} - \mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{42}\right\}$$

$$= -\Psi^+_{13} + i\Psi^+_{14}$$

反自对偶表示 $[(A)\lambda]$ 中的三个状态构成 $\mathcal{A}_1$ 子代数的三重态

$$\sqrt{\frac{1}{2}}\, F_1 \begin{array}{|c|}\hline 1 \\ \hline 3 \\ \hline\end{array} = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(\begin{array}{|c|}\hline 1 \\ \hline 4 \\ \hline\end{array} + \begin{array}{|c|}\hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline\end{array}\right) = \sqrt{1/2}\left\{\Phi_{14} - \Phi_{41} + \Phi_{23} - \Phi_{32}\right\}$$

$$= \sqrt{1/8}\left\{-(\Theta_1 + i\Theta_2)(\Theta_1 - i\Theta_2) + (\Theta_1 - i\Theta_2)(\Theta_1 + i\Theta_2)\right.$$

$$\left. + (\Theta_3 + i\Theta_4)(\Theta_3 - i\Theta_4) - (\Theta_3 - i\Theta_4)(\Theta_3 + i\Theta_4)\right\}$$

$$= i\sqrt{1/2}\left\{\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{12}, -\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{34}\right\} = i\sqrt{2}\Psi^-_{12}$$

$$\sqrt{\frac{1}{2}}\, F_1 \left\{\sqrt{\frac{1}{2}}\left(\begin{array}{|c|}\hline 1 \\ \hline 4 \\ \hline\end{array} + \begin{array}{|c|}\hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline\end{array}\right)\right\} = \begin{array}{|c|}\hline 2 \\ \hline 4 \\ \hline\end{array} = \Phi_{24} - \Phi_{42}$$

$$= (1/2)\left\{(\Theta_3 + i\Theta_4)(\Theta_1 - i\Theta_2) - (\Theta_1 - i\Theta_2)(\Theta_3 + i\Theta_4)\right\}$$

$$= (1/2)\left\{\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{31} + i\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{41} - i\mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{32} + \mathcal{Y}^{[1,1]}\Theta_{42}\right\}$$

$$= -\Psi^-_{13} - i\Psi^-_{14}$$

作为例子, 计算 SO(8) 群 (B_4 李代数) 的二阶无迹对称张量, 对应杨图是 $[2,0,0,0]$, 最高权是 $\boldsymbol{M} = (2,0,0,0)$. 素根 $\boldsymbol{r}_\mu$ 和基本主权 $\boldsymbol{w}_\mu$ 的关系是

$$\boldsymbol{r}_1 = 2\boldsymbol{w}_1 - \boldsymbol{w}_2, \qquad \boldsymbol{r}_2 = -\boldsymbol{w}_1 + 2\boldsymbol{w}_2 - \boldsymbol{w}_3 - \boldsymbol{w}_4,$$

$$\boldsymbol{r}_3 = -\boldsymbol{w}_2 + 2\boldsymbol{w}_3, \qquad \boldsymbol{r}_4 = -\boldsymbol{w}_2 + 2\boldsymbol{w}_4$$

用球谐基表出的正则张量杨表为

$$\begin{array}{|c|c|}\hline a & b \\ \hline\end{array} = \Phi_{ab} + \Phi_{ba}, \qquad \begin{array}{|c|c|}\hline a & a \\ \hline\end{array} = 2\Phi_{aa}$$

由正则张量杨表构成的迹张量为

$$\begin{aligned}
&-\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 8 \\ \hline\end{array} + \begin{array}{|c|c|}\hline 2 & 7 \\ \hline\end{array} - \begin{array}{|c|c|}\hline 3 & 6 \\ \hline\end{array} + \begin{array}{|c|c|}\hline 4 & 5 \\ \hline\end{array} \\
&= -\Phi_{18} - \Phi_{81} + \Phi_{27} + \Phi_{72} - \Phi_{36} - \Phi_{63} + \Phi_{45} + \Phi_{54} \\
&= \frac{1}{2}(\Theta_1 + i\Theta_2)(\Theta_1 - i\Theta_2) + \frac{1}{2}(\Theta_1 - i\Theta_2)(\Theta_1 + i\Theta_2) + \cdots \\
&= \sum_{a=1}^{8} \Theta_a\Theta_a = \sum_{a=1}^{8} \Theta_{aa}
\end{aligned} \tag{9.26}$$

最高权态为

$$|(2,0,0,0)\rangle = \boxed{1 \mid 1} = 2\boldsymbol{\Phi}_{11}$$

用画方块权图的方法, 可以算出表示 (2,0,0,0) 的所有状态基的展开式, 算出降算符在这组基中的非零矩阵元素. 表示 (2,0,0,0) 包含重权 (0,0,0,0), 下面只计算与重权相关的部分. 全部计算结果列于图 9.2. 经过若干步计算后, 得

$$|(0,\overline{1},2,0)\rangle = F_2|(\overline{1},1,1,\overline{1})\rangle = \sqrt{2}\,\boxed{3 \mid 5}\,,$$

$$|(\overline{1},2,\overline{1},\overline{1})\rangle = F_3|(\overline{1},1,1,\overline{1})\rangle = \sqrt{2}\,\boxed{2 \mid 6}\,,$$

$$|(0,\overline{1},0,2)\rangle = F_2|(\overline{1},1,\overline{1},1)\rangle = \sqrt{2}\,\boxed{3 \mid 4}\,,$$

$$|(2,\overline{1},0,0)\rangle = F_2|(1,1,\overline{1},\overline{1})\rangle = \sqrt{2}\,\boxed{1 \mid 7}\,,$$

$$F_1|(1,1,\overline{1},\overline{1})\rangle = F_4|(\overline{1},1,\overline{1},1)\rangle = |(\overline{1},2,\overline{1},\overline{1})\rangle\,,$$

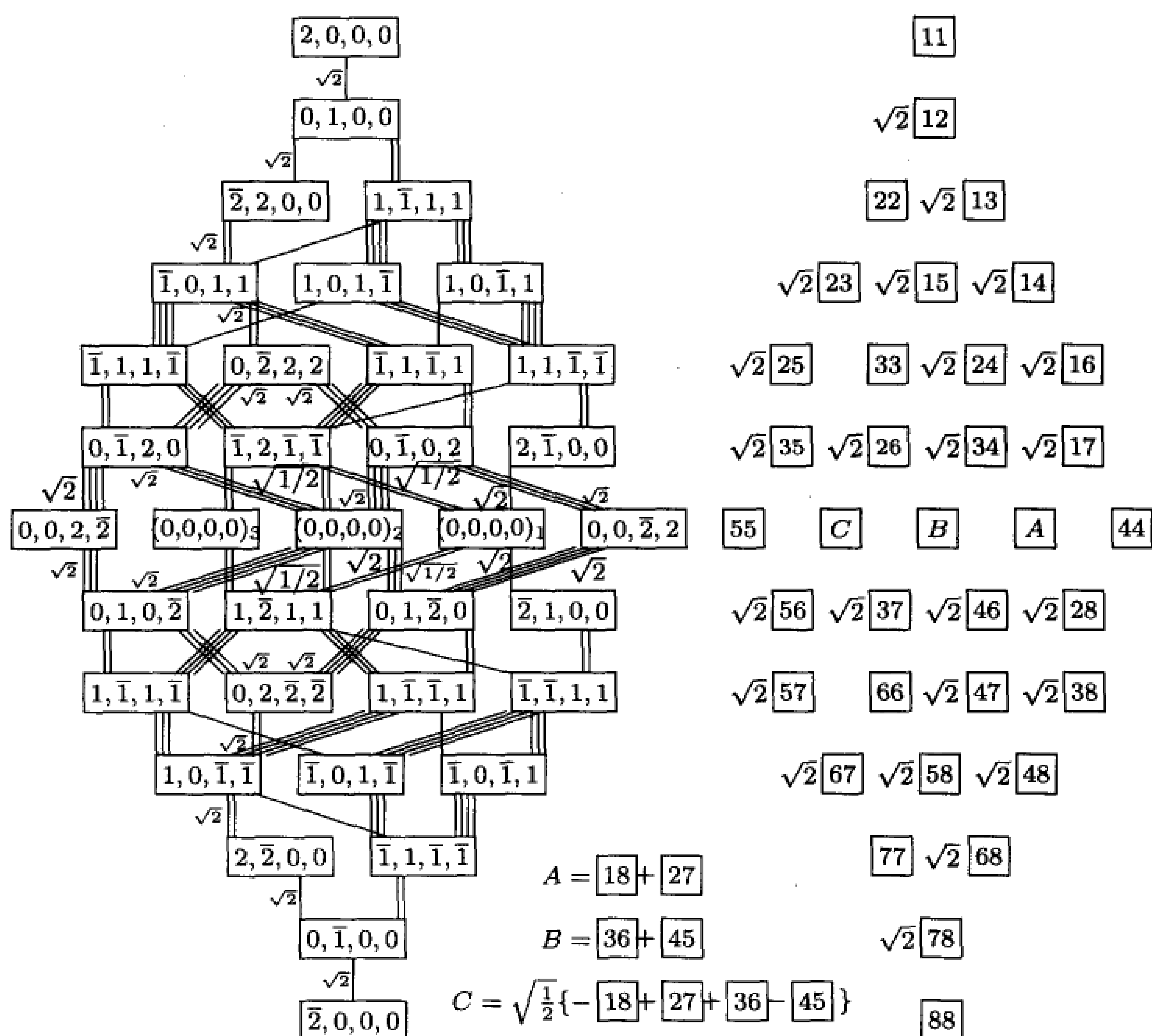


图 9.2 SO(8) 群表示 [2,0,0,0] 的方块权图和张量基

$$
\begin{aligned}
&F_3|(0,\overline{2},2,2)\rangle = \sqrt{2}|(0,\overline{1},0,2)\rangle\ ,\\
&F_4|(0,\overline{2},2,2)\rangle = \sqrt{2}|(0,\overline{1},2,0)\rangle\ ,\\
&|(0,0,\overline{2},2)\rangle = \sqrt{1/2}F_3|(0,\overline{1},0,2)\rangle = \boxed{4}\boxed{4}\ ,\\
&|(0,0,2,\overline{2})\rangle = \sqrt{1/2}F_4|(0,\overline{1},2,0)\rangle = \boxed{5}\boxed{5}
\end{aligned}
$$

由前四个状态基可以分别构造一个 $\mathcal{A}_\mu$ 三重态, 而且三重态中都包含权为 $(0,0,0,0)$ 的态, 因而主权 $(0,0,0,0)$ 可能是四重权. 设 $|(0,0,0,0)_1\rangle$ 属于 $\mathcal{A}_1$ 三重态, 其他三个属 $\mathcal{A}_1$ 单态, $|(0,0,0,0)_2\rangle$ 与 $|(0,0,0,0)_1\rangle$ 适当组合后属于 $\mathcal{A}_3$ 三重态, $|(0,0,0,0)_3\rangle$ 和 $|(0,0,0,0)_4\rangle$ 属 $\mathcal{A}_3$ 单态, $|(0,0,0,0)_3\rangle$ 和 $|(0,0,0,0)_1\rangle$, $|(0,0,0,0)_2\rangle$ 适当组合后属于 $\mathcal{A}_2$ 三重态, $|(0,0,0,0)_4\rangle$ 属 $\mathcal{A}_2$ 单态

$$
\begin{aligned}
&|(0,0,0,0)_1\rangle = \sqrt{1/2}F_1\ |(2,\overline{1},0,0)\rangle = F_1 \boxed{1}\boxed{7} = \boxed{1}\boxed{8} + \boxed{2}\boxed{7}\ ,\\
&E_1\ |(0,0,0,0)_2\rangle = E_1\ |(0,0,0,0)_3\rangle = E_1\ |(0,0,0,0)_4\rangle = 0\ ,\\
&E_3\ |(0,0,0,0)_3\rangle = E_3\ |(0,0,0,0)_4\rangle = E_2\ |(0,0,0,0)_4\rangle = 0\ ,\\
&F_3\ |(0,\overline{1},2,0)\rangle = a_1\ |(0,0,0,0)_1\rangle + a_2\ |(0,0,0,0)_2\rangle\ ,\\
&F_2\ |(\overline{1},2,\overline{1},\overline{1})\rangle = b_1\ |(0,0,0,0)_1\rangle + b_2\ |(0,0,0,0)_2\rangle + b_3\ |(0,0,0,0)_3\rangle\ ,\\
&F_4\ |(0,\overline{1},0,2)\rangle = c_1\ |(0,0,0,0)_1\rangle + c_2\ |(0,0,0,0)_2\rangle\\
&\qquad\qquad + c_3\ |(0,0,0,0)_3\rangle + c_4\ |(0,0,0,0)_4\rangle
\end{aligned}
\tag{9.27}
$$

其中, $a_1^2 + a_2^2 = b_1^2 + b_2^2 + b_3^2 = c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + c_4^2 = 2$. 与式 (9.26) 比较, $|(0,0,0,0)_1\rangle$ 明显是无迹张量. 用 E_1 作用在后三式上, 得

$$
\begin{aligned}
&E_1F_3\ |(0,\overline{1},2,0)\rangle = \sqrt{2}a_1\ |(2,\overline{1},0,0)\rangle = F_3E_1\ |(0,\overline{1},2,0)\rangle = 0\ ,\\
&E_1F_2\ |(\overline{1},2,\overline{1},\overline{1})\rangle = \sqrt{2}b_1\ |(2,\overline{1},0,0)\rangle\\
&\qquad = F_2E_1\ |(\overline{1},2,\overline{1},\overline{1})\rangle = F_2\ |(1,1,\overline{1},\overline{1})\rangle = |(2,\overline{1},0,0)\rangle\ ,\\
&E_1F_4\ |(0,\overline{1},0,2)\rangle = \sqrt{2}c_1\ |(2,\overline{1},0,0)\rangle = F_4E_1\ |(0,\overline{1},0,2)\rangle = 0
\end{aligned}
$$

得 $b_1 = \sqrt{1/2}$ 和 $a_1 = c_1 = 0$. 选择 $|(0,0,0,0)_2\rangle$ 的位相, 使 a_2 是正实数, 解得 $a_2 = \sqrt{2 - a_1^2} = \sqrt{2}$. 再用 E_3 作用在 (9.27) 后两式上

$$
\begin{aligned}
&E_3F_2\ |(\overline{1},2,\overline{1},\overline{1})\rangle = \sqrt{2}b_2\ |(0,\overline{1},2,0)\rangle\\
&\qquad = F_2E_3\ |(\overline{1},2,\overline{1},\overline{1})\rangle = F_2\ |(\overline{1},1,1,\overline{1})\rangle = |(0,\overline{1},2,0)\rangle\ ,\\
&E_3F_4\ |(0,\overline{1},0,2)\rangle = \sqrt{2}c_2\ |(0,\overline{1},2,0)\rangle\\
&\qquad = F_4E_3\ |(0,\overline{1},0,2)\rangle = \sqrt{2}F_4\ |(0,\overline{2},2,2)\rangle = 2\ |(0,\overline{1},2,0)\rangle
\end{aligned}
$$

解得 $b_2 = \sqrt{1/2}$ 和 $c_2 = \sqrt{2}$. 选择 $|(0,0,0,0)_3\rangle$ 的位相, 使 b_3 是正实数, 解得 $b_3 = \sqrt{2 - b_1^2 - b_2^2} = 1$. 因为 $c_2 = \sqrt{2}$, c_3 和 c_4 都只能为零. 权 $(0,0,0,0)$ 是三重权. 由此算得

$$\begin{aligned}
&|(0,0,0,0)_2\rangle = \sqrt{1/2}F_3|(0,\bar{1},2,0)\rangle = \boxed{3\,|\,6} + \boxed{4\,|\,5}\,,\\
&|(0,0,0,0)_3\rangle = F_2|(\bar{1},2,\bar{1},\bar{1})\rangle - \sqrt{1/2}|(0,0,0,0)_1\rangle - \sqrt{1/2}|(0,0,0,0)_2\rangle\\
&\quad = \sqrt{1/2}\left\{2F_2\boxed{2\,|\,6} - \boxed{1\,|\,8} - \boxed{2\,|\,7} - \boxed{3\,|\,6} - \boxed{4\,|\,5}\right\}\\
&\quad = \sqrt{1/2}\left\{-\boxed{1\,|\,8} + \boxed{2\,|\,7} + \boxed{3\,|\,6} - \boxed{4\,|\,5}\right\}
\end{aligned}$$

与式 (9.26) 比较知, 它们确都是无迹张量.

四、SO(N) 群不可约张量表示的维数

这里给出一种利用杨图计算 SO(N) 群不可约张量表示 $[\lambda]$ 维数的钩形规则, 其中杨图 $[\lambda]$ 前两列格数之和不大于 N. 在这规则中, 表示维数表为一个分数, 分子和分母分别是给定杨图 $[\lambda]$ 的一定表中所有填数的乘积. 当杨图 $[\lambda]$ 行数等于 $N/2$ 时, 由于表示分解为自对偶和反自对偶两个表示的直和, 表示维数还要再除以 2. 由于张量要取无迹条件, 这钩形规则远比 SU(N) 群和置换群的钩形规则要复杂, 主要是作为分子的表计算比较复杂.

$$d_{[\lambda]}(\mathrm{SO}(N)) = \begin{cases} \dfrac{Y_T^{[\lambda]}}{Y_h^{[\lambda]}}, & \text{当 } [\lambda] \text{ 的行数不等于 } N/2 \\[2ex] \dfrac{Y_T^{[\lambda]}}{2Y_h^{[\lambda]}}, & \text{当 } [\lambda] \text{ 的行数等于 } N/2 \end{cases} \tag{9.28}$$

为了说清楚分子和分母表的填法, 先定义杨图 $[\lambda]$ 的钩形路径 $(i,\ j)$, 它是一条钩形通道, 由杨图 $[\lambda]$ 第 i 行最右面格子处进入杨图, 向左走到第 i 行第 j 列处向下转弯, 在第 j 列最下面格子处离开杨图. 而逆钩形路径 $\overline{(i,\ j)}$ 与钩形路径 $(i,\ j)$ 形状相同, 只是走向相反. 两条钩形路径在杨图中经过的格子数就是第 i 行第 j 列格子的钩形数 h_{ij}. 分母的表 $Y_h^{[\lambda]}$ 是在杨图 $[\lambda]$ 各格填以该格的构形数 h_{ij}, 分母是表中所填数的乘积. 对杨图 $[\lambda]$, 按下面规则相继定义一系列的表 $Y_{T_a}^{[\lambda]}$, 分子的表 $Y_T^{[\lambda]}$ 是在杨图 $[\lambda]$ 各格填以上述系列中各表 $Y_{T_a}^{[\lambda]}$ 对应格子填数之和, 分子是表 $Y_T^{[\lambda]}$ 中所填数的乘积.

表 $Y_{T_a}^{[\lambda]}$ 由下面规则定义:

(1) 表 $Y_{T_0}^{[\lambda]}$ 是在杨图 $[\lambda]$ 各格填以 N 和容度 $m_{ij} = j - i$ 之和, 即第 i 行第 j 列格子填以 $N + j - i$.

(2) 设 $[\lambda^{(1)}] = [\lambda]$. 由 $[\lambda^{(1)}]$ 开始, 相继定义一系列 $[\lambda^{(a)}]$, 其中 $[\lambda^{(a)}]$ 是由 $[\lambda^{(a-1)}]$ 移去第一行和第一列得到. 这过程一直进行到 $[\lambda^{(a-1)}]$ 的列数少于 2 为止.

(3) 如果 $[\lambda^{(a)}]$ 列数大于 1, 按下法定义表 $Y^{[\lambda]}_{T_a}$. 在杨图 $[\lambda]$ 前 $a-1$ 行和前 $a-1$ 列都填以零, 余下部分钩成杨图 $[\lambda^{(a)}]$. 设杨图 $[\lambda^{(a)}]$ 含 r 行, 在杨图 $[\lambda^{(a)}]$ 中的钩形路径 (1, 1) 前 r 格, 逐格填以 $(\lambda^{(a)}_1-1)$, $(\lambda^{(a)}_2-1)$, $\cdots$, $(\lambda^{(a)}_r-1)$, 在杨图 $[\lambda^{(a)}]$ 每个逆钩形路径 $\overline{(i,\ 1)}$, $1\leqslant i\leqslant r$, 前 $(\lambda^{(a)}_i-1)$ 格填以 -1. 如果几个 -1 填在同一格, 则填数相加. 其余格子都填零. 在杨图 $[\lambda^{(a)}]$ 中填数之和为零.

下面举些例子来说明维数公式 (9.28) 的用法.

例 1　SO(7) 群的表示 [3, 3, 3] 的维数

$$Y^{[3,3,3]}_T=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 7&8&9\\\hline 6&7&8\\\hline 5&6&7\\\hline\end{array}+\begin{array}{|c|c|c|}\hline 2&2&2\\\hline -2&&\\\hline -3&-1&\\\hline\end{array}+\begin{array}{|c|c|c|}\hline &&\\\hline &1&1\\\hline &-2&\\\hline\end{array}=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 9&10&11\\\hline 4&8&9\\\hline 2&3&7\\\hline\end{array}$$

$$d_{[3,3,3]}(\mathrm{SO}(7))=\frac{\begin{array}{|c|c|c|}\hline 9&10&11\\\hline 4&8&9\\\hline 2&3&7\\\hline\end{array}}{\begin{array}{|c|c|c|}\hline 5&4&3\\\hline 4&3&2\\\hline 3&2&1\\\hline\end{array}}=11\times 9\times 7\times 2=1386$$

例 2　SO(N) 群一行杨图 [n] 对应表示的维数

$$\begin{aligned}d_{[n]}(\mathrm{SO}(N))&=\frac{\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline N&N+1&\cdots&N+n-1\\\hline\end{array}+\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline -1&\cdots&-1&n-1\\\hline\end{array}}{\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline n&n-1&\cdots&1\\\hline\end{array}}\\&=\begin{array}{|c|c|c|c|c|}\hline N-1&N&\cdots&N+n-3&N+2n-2\\\hline\end{array}\ /n!\\&=\frac{(N+n-3)!(N+2n-2)}{(N-2)!n!}\\&=\frac{N+2n-2}{N-2}\begin{pmatrix}N+n-3\\ n\end{pmatrix}\end{aligned}\tag{9.29}$$

对 $N=3$, 4 和 5, 有

$$\begin{aligned}&d_{[n]}(\mathrm{SO}(3))=2n+1\ ,\\&d_{[n]}(\mathrm{SO}(4))=(n+1)^2\ ,\\&d_{[n]}(\mathrm{SO}(5))=(n+1)(n+2)(2n+3)/6\end{aligned}\tag{9.30}$$

例 3　SO(N) 群两行杨图 $[n,m]$ 对应表示的维数

$$Y_T^{[n,m]} = \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|c|}\hline N & N+1 & \cdots & N+m-2 & N+m-1 & \cdots & N+n-2 & N+n-1 \\ \hline N-1 & N & \cdots & N+m-3 & N+m-2 \\ \cline{1-5}\end{array}$$

$$+ \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|c|c|}\hline -1 & -1 & \cdots & -1 & -1 & \cdots & -1 & m-1 & n-1 \\ \hline -2 & -1 & \cdots & -1 & \\ \cline{1-5}\end{array}$$

$$+ \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|}\hline & & & & & & \\ \hline & -1 & \cdots & -1 & m-2 \\ \cline{1-5}\end{array}$$

$$= \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|c|}\hline N-1 & \cdots & N+m-3 & N+m-2 & \cdots & N+n-4 & N+n+m-3 & N+2n-2 \\ \hline N-3 & \cdots & N+m-5 & N+2m-4 \\ \cline{1-4}\end{array}$$

$$Y_h^{[n,m]} = \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|}\hline n+1 & \cdots & n-m+2 & n-m & \cdots & 1 \\ \hline m & \cdots & 1 \\ \cline{1-3}\end{array}$$

$$\begin{aligned} d_{[n,m]}(\mathrm{SO}(N)) \ &= \ \frac{(n-m+1)(N+n-4)!(N+m-5)!}{(n+1)!m!(N-2)!(N-4)!} \\ &\quad \times (N+n+m-3)(N+2n-2)(N+2m-4) \end{aligned} \tag{9.31}$$

对 SO(5) 群和 SO(4) 群有

$$\begin{aligned} &d_{[n,m]}(\mathrm{SO}(5)) = (n-m+1)(n+m+2)(2n+3)(2m+1)/6 \ , \\ &d_{[n,m]}(\mathrm{SO}(4)) = (n-m+1)(n+m+1) \end{aligned} \tag{9.32}$$

在计算 SO(4) 群两行杨图对应表示的维数时, 已考虑到式 (9.28) 分母中的因子 2.

对只有一列的杨图 $[1^n]$, 不存在无迹条件. 当 $n < N/2$ 时, 有

$$d_{[1^n]}(\mathrm{SO}(N)) \ = \ \begin{pmatrix} N \\ n \end{pmatrix} \ = \ \frac{N!}{n!(N-n)!}, \qquad n < N/2 \tag{9.33}$$

五、SO(N) 群的伴随表示

以李代数 (李群) 最大根作为最高权的表示是李代数的伴随表示. 附录 29 已经指出, SO(N) 群伴随表示的最高权为 $(0,1,0,\cdots,0)$, 由式 (9.18) 和式 (9.24) 算得伴随表示的杨图为 $[1,1,0,\cdots,0]$. 因为在李群中伴随表示特别重要, 所以我们再用更直接的方法来研究 SO(N) 群伴随表示, 把按伴随表示变换的张量分量与二阶反对称张量分量直接联系起来.

SO(N) 群自身表示的 $N(N-1)/2$ 个生成元 T_{ab}, 构成 N 维反对称矩阵的完备基, 任何 N 维反对称矩阵都可按它们展开. 为了表述方便, 把这 $N(N-1)/2$ 个生成元做适当编号, 得 T_A, $1 \leqslant A \leqslant N(N-1)/2$, 它们满足归一条件

$$\mathrm{Tr}\,(T_A T_B) = 2\delta_{AB} \tag{9.34}$$

设 $R \in$SO(N), 根据伴随表示的定义 (7.8), 有

$$RT_AR^{-1} = \sum_{B+1}^{N(N-1)/2} T_B D^{\mathrm{ad}}_{BA}(R) \tag{9.35}$$

SO(N) 群的二阶反对称张量 $\boldsymbol{T}_{ab}$ 在 SO(N) 变换中也有类似关系

$$(O_R\boldsymbol{T})_{ab} = \sum_{cd} R_{ac}\boldsymbol{T}_{cd}\left(R^{-1}\right)_{db} = \left(R\boldsymbol{T}R^{-1}\right)_{ab}$$

把 $\boldsymbol{T}_{ab}$ 看成 N 维反对称矩阵, 按 $(T_A)_{ab}$ 展开, 展开系数是张量 $\boldsymbol{F}_A$

$$\boldsymbol{T}_{ab} = \sum_{A=1}^{N(N-1)/2} (T_A)_{ab}\boldsymbol{F}_A, \qquad \boldsymbol{F}_A = \frac{1}{2}\sum_{ab}(T_A)_{ba}\boldsymbol{T}_{ab} \tag{9.36}$$

上式也可以理解为 $\boldsymbol{T}_{ab}$ 按 $\boldsymbol{F}_A$ 展开, $(T_A)_{ab}$ 是展开系数. 这是同一张量空间张量分量的组合, 它们应该按等价的表示变换. 我们来讨论 $\boldsymbol{F}_A$ 在 SO(N) 变换中的变换规律

$$\begin{aligned}(O_R\boldsymbol{T})_{ab} &= \left(R\boldsymbol{T}R^{-1}\right)_{ab} = \sum_A \left(RT_AR^{-1}\right)_{ab}\boldsymbol{F}_A \\ &= \sum_B (T_A)_{ab}\left\{\sum_A D^{\mathrm{ad}}_{BA}(R)\boldsymbol{F}_A\right\} \\ &= \sum_B (T_B)_{ab}O_R\boldsymbol{F}_B\end{aligned}$$

$$(O_R\boldsymbol{F})_B = \sum_A D^{\mathrm{ad}}_{BA}(R)\boldsymbol{F}_A \tag{9.37}$$

$\boldsymbol{F}_B$ 按伴随表示变换. 这说明, SO(N) 群伴随表示等价于二阶反对称张量表示 [1, 1]. $\boldsymbol{T}_{ab}$ 和 $\boldsymbol{F}_A$ 都是按 SO(N) 群伴随表示变换的张量. SO(3) 群伴随表示等价于自身表示, $[1,1] \simeq [1]$. $N > 4$ 时, SO(N) 群的伴随表示是不可约表示. 因此当 $N = 3$ 和 $N > 4$ 时, SO(N) 群是单纯李群, 它们不存在不变子李群. SO(4) 群的伴随表示是可约表示, 以后将直接证明, SO(4) 群同态于两个 SU(2) 群的直乘.

9.2　N 维空间角动量及其本征函数

对 SO(N) 群, 物理中更常用的不是不可约张量基, 而是属不可约表示 $[\lambda]$ 的标量函数 $\psi^{[\lambda]}_{\boldsymbol{m}}(x)$

$$P_R\psi^{[\lambda]}_{\boldsymbol{m}}(x) = \psi^{[\lambda]}_{\boldsymbol{m}}(R^{-1}x) = \sum_{\boldsymbol{m}'}\psi^{[\lambda]}_{\boldsymbol{m}'}(x)D^{[\lambda]}_{\boldsymbol{m}'\boldsymbol{m}}(R) \tag{9.38}$$

其中, P_R 是标量函数变换算符 (见第三章), $\boldsymbol{m}$ 是权矢量. 本节研究这样的标量函数的性质.

一、N 维空间的角动量算符

SO(N) 群的微量微分算符 (见第四章), 也就是标量函数变换算符 P_R 的生成元, 称为 N 维空间的轨道角动量算符 L_{ab}, 简称角动量算符. 单粒子系统的角动量算符为

$$L_{ab} = -\mathrm{i}r_a \frac{\partial}{\partial r_b} + \mathrm{i}r_b \frac{\partial}{\partial r_a}$$

对 n 个粒子系统, 有

$$L_{ab} = -\mathrm{i}\sum_{k=1}^{n} \left\{ r_{ka}\frac{\partial}{\partial r_{kb}} - r_{kb}\frac{\partial}{\partial r_{ka}} \right\} \tag{9.39}$$

其中, r_{ka} 是第 k 个粒子的坐标矢量 $\boldsymbol{r}_k$ 的第 a 个分量. 与第四章一样, 我们省略了作为角动量单位的普朗克 (Planck) 常数 $\hbar$, 即取 $\hbar = 1$. 角动量算符满足 SO(N) 群生成元的共同对易关系式 (9.12), 二阶卡西米尔算符就是角动量平方算符 L^2

$$L^2 = \sum_{a<b=2}^{N} L_{ab}^2 \tag{9.40}$$

利用式 (9.18) 和式 (9.24) 的转换, 可算得 $[\lambda]$ 表示的最高权 $\boldsymbol{M}$. 在此表示中 L^2 算符的本征值, 即二阶卡西米尔不变量 $C_2(\boldsymbol{M})$, 由公式 (7.145) 计算. 经过直接计算 [见第七章第 6 题], 对 SO(N) 群, 无论 $N = 2\ell + 1$ 还是 $N = 2\ell$, 都有

$$C_2([\lambda]) \equiv C_2(\boldsymbol{M}) = \sum_{\mu=1}^{\ell} \lambda_\mu (\lambda_\mu + N - 2\mu) \tag{9.41}$$

对 SO(3) 群, 杨图只有一行, 最高权只有一个分量, L^2 的本征值只用一个参数描写. 现在角动量平方算符 L^2 的本征值用最高权 $\boldsymbol{M}$ 或杨图 $[\lambda]$ 描写, 一般包含 ℓ 个参数.

角动量算符也可以按照式 (9.15) 和式 (9.21) 组合成谢瓦莱基 $H_\mu(L)$, $E_\mu(L)$ 和 $F_\mu(L)$, 其中只是把 T_{ab} 换成 L_{ab}. 由于 $D^{[\lambda]}_{\boldsymbol{m},\boldsymbol{m}'}(H_\mu)$ 取对角形式, 在 SO(N) 变换中按式 (9.38) 变换的标量函数 $\psi^{[\lambda]}_{\boldsymbol{m}}(x)$ 是 L^2 和 $H_\mu(L)$ 的共同本征函数, 本征值是 $C_2([\lambda])$ 和权 $\boldsymbol{m}$ 的分量 m_μ.

二、空间平移不变性和转动不变性

孤立的量子 n 体系统存在空间平移不变性和转动不变性. 由于平移不变性, 系统的质心运动可以与系统内部运动分离开来. 在质心坐标系中, 系统只有 $n-1$ 个独立坐标矢量, 常采用雅可比 (Jacobi) 坐标矢量 $\boldsymbol{R}_j$, $0 \leqslant j \leqslant n-1$ (见附录 38), 其中 $\boldsymbol{R}_0$ 描写质心的运动. 拉普拉斯算符和角动量平方算符表达式都只是用 $\boldsymbol{R}_j$ 取代 $\boldsymbol{r}_k$

$$\sum_{k=1}^{n} m_k^{-1}\nabla^2_{\boldsymbol{r}_k} = \sum_{j=0}^{n-1} \nabla^2_{\boldsymbol{R}_j}$$

$$L_{ab} = -\mathrm{i}\sum_{k=1}^{n} \left\{ r_{ka}\frac{\partial}{\partial r_{kb}} - r_{kb}\frac{\partial}{\partial r_{ka}} \right\} = -\mathrm{i}\sum_{j=0}^{n-1} \left\{ R_{ja}\frac{\partial}{\partial R_{jb}} - R_{jb}\frac{\partial}{\partial R_{ja}} \right\} \tag{9.42}$$

其中, R_{ja} 是雅可比坐标矢量 $\boldsymbol{R}_j$ 的第 a 个分量. 在质心系 $\boldsymbol{R}_0 = 0$, 系统的独立变量有 $N(n-1)$ 个. 由于转动不变性, 总角动量守恒. 系统波函数可组合成角动量本征函数 $\psi^{[\lambda]}_{\boldsymbol{m}}(x)$, 它可以按一组独立且完备的角动量本征函数基展开, 展开系数是内部变量的函数, 称为广义径向函数. 这里所谓"独立"的角动量本征函数基, 是指在这组用 R_{ka} 作为变量构造出的完备的角动量本征函数基中, 任何一个函数基都不能表为其他函数基的线性组合, 组合系数是内部变量的函数. 所谓内部变量就是在转动变换中保持不变的变量.

当 $N \geqslant n$ 时, 由于只有 $n-1$ 个雅可比坐标矢量 $\boldsymbol{R}_j$, 它们在 N 维空间中张开一个 $n-1$ 维子空间, 系统对余下的 $N-n+1$ 维子空间的转动是保持不变的, 因而描写系统转动的变量数是 SO(N) 群和 SO($N-n+1$) 群的阶数之差, 即 $N(N-1)/2-(N-n+1)(N-n)/2=(n-1)(2N-n)/2$, 内部变量数目是 $N(n-1)-(n-1)(2N-n)/2=n(n-1)/2$. 内部变量常取为

$$\xi_{jk} = \boldsymbol{R}_j \cdot \boldsymbol{R}_k, \qquad 1 \leqslant j \leqslant k \leqslant n-1 \tag{9.43}$$

当 $N < n$ 时, 描写系统转动的变量数就是 SO(N) 群的阶数 $N(N-1)/2$, 内部变量数是 $N(n-1)-N(N-1)/2=N(N-1)/2+N(n-N)$. 任取 $N-1$ 个雅可比坐标矢量, 例如前 $N-1$ 个, 就完全确定了动坐标系的位置, 而式 (9.43) 的变量不能唯一描写余下坐标矢量的位置. 建议采用坐标矢量在一个斜坐标系中的分量作为内部变量, 它们是 R_{ja} 的多项式. 这斜坐标系的前 $N-1$ 个坐标轴沿前 $N-1$ 个 $\boldsymbol{R}_j$ 方向, 最后一个坐标轴方向由右手螺旋规则决定.

$$\begin{gathered} \xi_{jk} = \boldsymbol{R}_j \cdot \boldsymbol{R}_k, \qquad \zeta_\alpha = \sum_{a_1\cdots a_N} \epsilon_{a_1\cdots a_N} R_{1a_1}\cdots R_{(N-1)a_{N-1}} R_{\alpha a_N}, \\ 1 \leqslant j \leqslant N-1, \qquad j \leqslant k \leqslant n-1, \qquad N \leqslant \alpha \leqslant n-1 \end{gathered} \tag{9.44}$$

三、N 维空间的球谐函数

对量子二体系统, 只有一个雅可比坐标矢量, 它就是两粒子的相对坐标, $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$. 正因为只有一个坐标矢量, 由它的分量无法构成反对称组合. 由 $\boldsymbol{x}$ 的标量函数构成的角动量本征函数称为 N 维空间的球谐函数, 记作 $Y^{[\lambda_1]}_{\boldsymbol{m}}(\hat{\boldsymbol{x}})$, 它对应表示的杨图只能是一行的杨图 $[\lambda_1, 0, \cdots, 0] \equiv [\lambda_1]$.

定义 N 个标量函数 $\phi_a(\boldsymbol{x}) = x_a$, $1 \leqslant a \leqslant N$, 在 SO($N$) 变换中做如下变换

$$P_R\phi_a(\boldsymbol{x}) = \phi_a(R^{-1}\boldsymbol{x}) = \sum_{b=1}^{N} \left(R^{-1}\right)_{ab} x_b = \sum_{b=1}^{N} \phi_b(\boldsymbol{x}) R_{ba} \tag{9.45}$$

P_R 的生成元是 L_{ab}. 这变换与矢量基 $\boldsymbol{\Theta}_a$ 的变换式 (9.4) 非常相像

$$O_R\boldsymbol{\Theta}_a = \sum_{b=1}^{N} \boldsymbol{\Theta}_b R_{ba}$$

O_R 在自身表示中的生成元是 T_{ab}. L_{ab} 和 T_{ab} 可以用相同方式组合成谢瓦莱基. 谢瓦莱基 $H_\mu(T)$ 的共同本征矢量就是球谐基 $\boldsymbol{\Phi}_\alpha$, 它们由矢量基 $\boldsymbol{\Theta}_a$ 组合得到. 谢瓦莱基 $H_\mu(L)$ 的共同本征函数称为球谐坐标 $\psi_\alpha(\boldsymbol{x})$, 它们可由直角坐标 $\phi_a(\boldsymbol{x}) = x_a$ 通过相同方式组合得到. 当 $N = 2\ell + 1$ 时, 由式 (9.16) 得

$$\psi_\alpha(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} (-1)^{\ell-\alpha+1}\sqrt{1/2}\,(x_{2\alpha-1} + \mathrm{i}x_{2\alpha}), & 1 \leqslant \alpha \leqslant \ell \\ x_{2\ell+1}, & \alpha = \ell + 1 \\ \sqrt{1/2}\,(x_{4\ell-2\alpha+3} - \mathrm{i}x_{4\ell-2\alpha+4}), & \ell + 2 \leqslant \alpha \leqslant 2\ell + 1 \end{cases} \tag{9.46}$$

当 $N = 2\ell$ 时, 由式 (9.22) 得

$$\psi_\alpha(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} (-1)^{\ell-\alpha}\sqrt{1/2}\,(x_{2\alpha-1} + \mathrm{i}x_{2\alpha}), & 1 \leqslant \alpha \leqslant \ell \\ \sqrt{1/2}\,(x_{4\ell-2\alpha+1} - \mathrm{i}x_{4\ell-2\alpha+2}), & \ell + 1 \leqslant \alpha \leqslant 2\ell \end{cases} \tag{9.47}$$

$\psi_\alpha(\boldsymbol{x})$ 是属自身表示 $[1, 0, \cdots, 0]$ 的函数. 式 (9.17) 和式 (9.23) 给出了指标 α 与权 $\boldsymbol{m}$ 的换算关系, 其中最高权态是

$$\psi_1(\boldsymbol{x}) \sim (x_1 + \mathrm{i}x_2) \tag{9.48}$$

我们知道, λ_1 阶无迹对称张量空间对应不可约表示 $[\lambda_1]$. 把球谐坐标 $\psi_\alpha(\boldsymbol{x})$ 自乘 λ_1 次, 构成 x_a 的 λ_1 次齐次多项式, 也属不可约表示 $[\lambda_1]$. 为消去量纲, 把这多项式除以 $|\boldsymbol{x}|^{\lambda_1}$, 并归一化后, 就得到广义球谐函数的最高权态 $\mathrm{Y}^{[\lambda_1]}_{\boldsymbol{M}}(\boldsymbol{x})$

$$\begin{aligned} \mathrm{Y}^{[\lambda_1]}_{\boldsymbol{M}}(\hat{\boldsymbol{x}}) &= C_{N,\lambda_1}|\boldsymbol{x}|^{-\lambda_1}(x_1 + \mathrm{i}x_2)^{\lambda_1} \\ C_{N,\lambda_1} &= \begin{cases} (-1)^{\ell\lambda_1}2^{-\ell-\lambda_1}\left\{\dfrac{(2\lambda_1 + 2\ell - 1)!}{\pi^{\ell}\lambda_1!(\lambda_1 + \ell - 1)!}\right\}^{1/2}, & N = 2\ell + 1 \\ (-1)^{(\ell-1)\lambda_1}\left\{\dfrac{(\lambda_1 + \ell - 1)!}{2\pi^{\ell}\lambda_1!}\right\}^{1/2}, & N = 2\ell \end{cases} \end{aligned} \tag{9.49}$$

其中, $|\boldsymbol{x}|$ 是坐标分量 x_a 平方和的开方, 称为矢径长度. C_{N,λ_1} 是归一化因子, 计算可参看文献 (见文献 [39] 和 [65]). 归一化因子中的符号来自 $\psi_1(\boldsymbol{x})$ 的符号, 见式 (9.46) 和 (9.47). 属同一不可约表示的其他权态可以用降算符作用在最高权态上得到, 计算方法已在上一节给出. 但在物理上, 由于系统各向同性, 知道最高权态常常已经够用了.

四、N 维空间的量子三体系统

对量子三体系统, 有两个雅可比坐标矢量, $\boldsymbol{x}$ 表第一个粒子相对后两个粒子质心的坐标, $\boldsymbol{y}$ 表后两粒子的相对坐标, 前面还要加上适当的质量权重. 正因为有两个坐标矢量, 由它们的分量构成的标量函数只能属用两行杨图 $[\lambda_1,\lambda_2,0,\cdots,0]\equiv[\lambda_1,\lambda_2]$, $\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant 0$, 描写的不可约表示. 按标准方法, 角动量本征函数可以由关于 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的球谐函数乘积, 用克莱布施 – 戈登系数组合得到. 设两个球谐函数对应的分角动量用一行的杨图 $[\omega]$ 和 $[\tau]$ 描写, 它们的乘积组合属表示 $[\lambda_1,\lambda_2]$, 则 $[\lambda_1,\lambda_2]$ 必须出现在乘积表示 $[\omega]\times[\tau]$ 约化的克莱布施 – 戈登级数中.

SO(N) 群两个不可约表示直乘分解的克莱布施 – 戈登级数所包含的表示由两部分组成. 一部分是按立特武德 – 理查森规则计算得到, 就像 SU(N) 群表示直乘分解一样. 另一部分是先把分属两表示的张量指标取迹, 然后再按立特武德 – 理查森规则计算得到. 用下标 LR 表按立特武德 – 理查森规则计算的级数. 不失普遍性设 $\omega\geqslant\tau$, 对表示直乘 $[\omega]\times[\tau]$, 有

$$\begin{aligned}
([\omega]\times[\tau])_{LR} &\simeq [\omega+\tau,0]\oplus[\omega+\tau-1,1]\oplus\cdots\oplus[\omega,\tau]\simeq\bigoplus_{s=0}^{\tau}[\omega+\tau-s,s]\\
[\omega]\times[\tau] &\simeq ([\omega]\times[\tau])_{LR}\oplus([\omega-1]\times[\tau-1])_{LR}\oplus\cdots\oplus([\omega-\tau]\times[0])_{LR}\\
&\simeq \bigoplus_{s=0}^{\tau}\bigoplus_{t=0}^{\tau-s}[\omega+\tau-s-2t,s]
\end{aligned}\tag{9.50}$$

对 SO(3) 群, s 只能等于 0 或 1, 而且 $[\lambda,1]\simeq[\lambda,0]$. 对 SO(4) 群, $s\neq 0$ 的表示还要分解为自对偶表示和反自对偶表示的直和.

因为作为独立的角动量本征函数基不应该包含内部变量的函数作为因子, 而一对指标取迹就意味着出现了内部变量函数的因子, 所以只有 $t=0$ 的表示才与独立的角动量本征函数基有关. 反过来说, 独立的角动量为 $[\lambda_1,\lambda_2]$ 的本征函数基只能在如下表示直乘分解中得到

$$([q]\times[\lambda_1+\lambda_2-q])_{LR}\simeq\bigoplus_{s=0}^{\min\{q,(\lambda_1+\lambda_2-q)\}}[\lambda_1+\lambda_2-s,s]=[\lambda_1,\lambda_2]\oplus\;\cdots\tag{9.51}$$

其中, $\lambda_2\leqslant q\leqslant\lambda_1$. 因此, 独立的角动量本征函数基有 $\lambda_1-\lambda_2+1$ 个, 分别由两个球谐函数 $\mathrm{Y}^{[q]}_{\boldsymbol{m}}(\hat{\boldsymbol{x}})$ 和 $\mathrm{Y}^{[\lambda_1+\lambda_2-q]}_{\boldsymbol{m}'}(\hat{\boldsymbol{y}})$ 的乘积, 通过克莱布施 – 戈登系数组合得到. 但是, 如何计算这克莱布施 – 戈登系数呢? 幸运的是, 物理上往往只需要知道对应最高权态的角动量本征函数基, 而且归一化因子也不重要. 即使要知道其他权态的角动量本征函数基, 应用上一节介绍的方块权图方法也可以由最高权态计算得到. 最高权态的波函数很容易写出来. 在上节我们已经知道, 对应最高权态的正则张量杨

表, 每格填数是该格所在行数. 对标量波函数, 填数 α 就对应因子 $\psi_\alpha(x)$ 或 $\psi_\alpha(y)$ 等, 还要注意对应同一列填数, 波函数要构成反对称组合.

对应表示 $[\lambda_1,\lambda_2]$ 的独立的最高权态共有 $\lambda_1-\lambda_2+1$ 个, 分别记作 $Y_q^{[\lambda_1,\lambda_2]}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$. 任选一个 $Y_q^{[\lambda_1,\lambda_2]}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$, 它包含 q 个与 $\boldsymbol{x}$ 有关的因子, $\lambda_1+\lambda_2-q$ 个与 $\boldsymbol{y}$ 有关的因子, 可以用另一个对应杨图 $[\lambda_1,\lambda_2]$ 的表来标记. 杨图中第一行左边 q 格填以 x, 其余格子填以 y. 例如, $[\lambda_1,\lambda_2]=[8,3]$, $q=5$, 这个表是

x	x	x	x	x	y	y	y
y	y	y					

这表中包含两行的列有 λ_2 个, 在只有一行的列中, $q-\lambda_2$ 个填 x, λ_1-q 个填 y, 对应的角动量本征函数基正比于

$$\begin{aligned} Y_q^{[\lambda_1,\lambda_2]}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \sim\ & (x_1+\mathrm{i}x_2)^{q-\lambda_2}(y_1+\mathrm{i}y_2)^{\lambda_1-q} \\ & \times\ \left[(x_1+\mathrm{i}x_2)(y_3+\mathrm{i}y_4)-(x_3+\mathrm{i}x_4)(y_1+\mathrm{i}y_2)\right]^{\lambda_2} \end{aligned} \tag{9.52}$$

对 SO(3) 群, 取 $x_4=y_4=0$. 对 SO(4) 群, 式 (9.52) 是属自对偶表示的角动量本征函数基, 属反自对偶表示的角动量本征函数基只需把 $(x_3+\mathrm{i}x_4)$ 和 $(y_3+\mathrm{i}y_4)$ 中间的加号改成减号. 容易验证式 (9.52) 在任何升算符 $E_\mu(L)$ 作用下得零, 在 $H_\mu(L)$ 作用下得表示 $[\lambda_1,\lambda_2]$ 的最高权分量 M_μ. 这样的本征函数基构成角动量为 $[\lambda_1,\lambda_2]$ 的最高权态的独立且完备的本征函数集. 这函数集中包含的本征函数基个数就是上述表的个数. 这表在形式上正好是 SU(2) 群表示 $[\lambda_1,\lambda_2]$ 对应的正则张量杨表, 因而这本征函数集中包含的角动量本征函数基的个数等于 SU(2) 群表示 $[\lambda_1,\lambda_2]$ 的维数 $d_{[\lambda_1,\lambda_2]}[\mathrm{SU}(2)]=\lambda_1-\lambda_2+1$.

这方法可以推广到 N 维空间量子 n 体系统. 当 $n\leqslant N$ 时, 角动量为 $[\lambda_1,\cdots,\lambda_n]$ 的最高权态记作 $Y_{(q_{jk})}^{[\lambda_1,\cdots,\lambda_n]}(\boldsymbol{R}_1,\cdots,\boldsymbol{R}_n)$, 分别用杨图为 $[\lambda_1,\cdots,\lambda_n]$ 的表标记, 表中第 k 行填 $\boldsymbol{R}_j$ 的格数为 q_{jk}, $j\geqslant k$. 这样的独立最高权态个数等于 SU$(n-1)$ 群表示 $[\lambda_1,\cdots,\lambda_n]$ 的维数 $d_{[\lambda_1,\cdots,\lambda_n]}[\mathrm{SU}(n-1)]$. 当 $n>N$ 时, 任取 $N-1$ 个雅可比坐标矢量构成角动量本征函数基, 形式与 $n=N$ 情况相同, 只是内部变量要取式 (9.44). 由于篇幅所限, 不再详细讨论.

9.3 O(N) 群的张量表示

O(N) 群的群空间分成不相连接的两片, 包含恒元的那一连续片对应 SO(N) 群. SO(N) 群是简单李群, 是 O(N) 群的不变子群, 关于它的不可约张量表示我们已研究清楚. 以 SO(N) 群的不可约表示为基础, 寻找 O(N) 群不可约表示的关键, 是找 SO(N) 群陪集中一个代表元素在这表示中的表示矩阵.

当 N 是奇数时, 通常选取 $\sigma = -\mathbf{1}$ 作为代表元素. σ 可与 O(N) 群中所有元素对易, 而且平方等于恒元, 因而它在不可约表示中的表示矩阵是常数矩阵, 且平方为单位矩阵

$$D(\sigma) = c\mathbf{1}, \qquad D(\sigma)^2 = \mathbf{1}, \qquad c = \pm 1 \tag{9.53}$$

设 SO(N) 群的元素记作 R, 陪集元素记作 $R' = \sigma R$, 则由 SO(N) 群的每一个不可约表示 $D^{[\lambda]}$, 可诱导出 O(N) 群两个不等价的不可约表示 $D^{[\lambda]\pm}$

$$D^{[\lambda]\pm}(R) = D^{[\lambda]}(R), \qquad D^{[\lambda]\pm}(\sigma R) = \pm D^{[\lambda]}(R) \tag{9.54}$$

这是式 (4.83) 的推广.

当 N 是偶数时, $-\mathbf{1}$ 属于 SO(N) 群. 另选代表元素 τ, 它与单位矩阵 $\mathbf{1}$ 的差别只是第 N 个对角元变成 -1, 而 $\tau^2 = \mathbf{1}$. 若张量基有奇数个指标取值 N, 则此张量基在 τ 变换中改变符号, 否则此张量基不变. 杨算符和置换变换引起的张量基的组合, 不改变张量基指标的取值, 只是改变指标的排列次序, 无迹条件使某些张量基线性相关, 但参与此线性关系的所有张量基, 它们的指标只能成对地发生变化. 这两类组合都不改变 τ 的本征值. 因此当杨图 $[\lambda]$ 的行数小于 $N/2$ 时, 可取独立且无迹的正则张量杨表为基, 在此基中 τ 的矩阵形式 $D^{[\lambda]}(\tau)$ 是对角化的, 对角元的取值决定于该正则张量杨表中所含取值为 N 的指标的奇偶性, 偶数时为 1, 奇数时为 -1. 改变 τ 表示矩阵的符号, 不影响群元素表示矩阵的乘积关系, 但得到另一个不等价的不可约表示. 设 SO(N) 群的元素记作 R, 陪集元素记作 $R' = \tau R$, 则当杨图 $[\lambda]$ 的行数小于 $N/2$ 时, 由 SO(N) 群的每一个不可约表示 $D^{[\lambda]}$, 可诱导出 O(N) 群两个不等价的不可约表示 $D^{[\lambda]\pm}$

$$D^{[\lambda]\pm}(R) = D^{[\lambda]}(R), \qquad D^{[\lambda]\pm}(\tau R) = \pm D^{[\lambda]}(\tau) D^{[\lambda]}(R) \tag{9.55}$$

当杨图 $[\lambda]$ 的行数等于 $N/2$ 时, SO(N) 群的张量子空间按照式 (9.9) 分解为自对偶和反自对偶两个不变张量子空间. 式 (9.9) 中参加组合的两个张量基, 它们包含的取值为 N 的指标, 刚好一个为偶数, 一个为奇数, 而自对偶和反自对偶张量的区别仅在于这两项的组合方式, 一个是相加, 一个是相减. 因此在 τ 变换中, 自对偶张量变成了反自对偶张量, 反之亦然. 即当 $N = 2\ell$ 时

$$\tau \mathbf{\Psi}^{\pm}_{a_1 \cdots a_\ell b \cdots} = \mathbf{\Psi}^{\mp}_{a_1 \cdots a_\ell b \cdots}, \quad 或 \quad \tau \mathbf{\Psi}^{\pm}_{a_1 \cdots a_\ell b \cdots} = -\mathbf{\Psi}^{\mp}_{a_1 \cdots a_\ell b \cdots}$$

取正号还是取负号依赖于张量分量中取值为 N 的指标个数的偶奇性. 正因为 τ 把自对偶和反自对偶两个张量子空间的基联系了起来. 自对偶和反自对偶两个张量子空间对 O(N) 群都不是不变的, 只有把它们直和起来, 才保持不变, 从而构成 O(N) 群的最小的不变张量子空间. 这样, 当杨图 $[\lambda]$ 的行数等于 $N/2$ 时, SO(N) 群的两

个不等价不可约表示 $[(S)\lambda]$ 和 $[(A)\lambda]$ 诱导出 O(N) 群一个不可约表示 $[\lambda]$, 表示的维数等于两个表示维数之和. 在直和空间 τ 的表示矩阵 $D^{[\lambda]}(\tau)$ 不包含对角元. 将表示矩阵 $D^{[\lambda]}(\tau)$ 改号相当做相似变换 X

$$X = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}$$

9.4 Γ 矩阵群

狄拉克 (Dirac) 方程中引入了四个 γ 矩阵, 它们是泡利矩阵的推广, 满足反对易关系. 依靠 γ 矩阵这一工具, 狄拉克找到了描写自旋为 1/2 的粒子的相对论波函数及其运动方程. 用群论的语言说, 狄拉克找到了洛伦兹群的旋量表示. 现在把 γ 矩阵这一工具推广, 用来研究 SO(N) 群的旋量表示. 通过对 SO(N) 群旋量表示的研究, 可能会加深对狄拉克旋量理论的理解. γ 矩阵乘积的集合构成 Γ 矩阵群, 它的群代数称为克利福德 (Clifford) 代数. 用群论方法研究 Γ 矩阵群, 是第三章有限群表示理论应用的一个典型例子.

一、Γ 矩阵群的一般性质

定义 N 个矩阵 γ_a, 它们满足反对易关系

$$\{\ \gamma_a,\ \gamma_b\ \} = \gamma_a\gamma_b + \gamma_b\gamma_a = 2\delta_{ab}\mathbf{1}, \qquad a,\ b \leqslant N \tag{9.56}$$

这关系除了告诉我们, 下标不相同的 γ_a 矩阵互相反对易外, 还告诉我们 γ_a 矩阵的平方等于单位矩阵, 即 γ_a 矩阵是自逆矩阵. 因此 γ 矩阵乘积的逆矩阵等于它们逆序相乘. 所有 γ 矩阵乘积的集合 Γ_N, 按照矩阵乘积规则, 满足群的四个条件, 因而构成群, 称为 Γ_N 矩阵群. 在 γ 矩阵乘积中, 相同下标的 γ_a 矩阵, 可以通过反对易关系 (9.56), 移到一起并消去, 因此 Γ_N 矩阵群是有限群, 而且群元素以互差负号的方式成对出现. 在每一对元素中, 取一个元素作为代表, 这样构成的集合记作 Γ'_N. 由于这集合不满足元素乘积的封闭性, 它不是群, 它包含元素数目等于 Γ_N 群阶数 $g^{(N)}$ 的一半.

除了反对易关系 (9.56) 外, 我们还没有定义 γ 矩阵的具体形式. 既然 γ 矩阵的乘积集合构成有限群 Γ_N, 可以选取 Γ_N 群的一个真实的不可约幺正表示作为 γ_a 矩阵自身形式的定义. 以后会看到, 这样的表示是存在的. 这里强调真实表示就是要求 γ_a 矩阵满足反对易关系 (9.56), 因而 γ_a 矩阵既是幺正矩阵, 又是厄米矩阵

$$\gamma_a^\dagger = \gamma_a^{-1} = \gamma_a \tag{9.57}$$

N 个 γ_a 矩阵顺序相乘, 记作 $\gamma_\chi^{(N)}$

$$\gamma_\chi^{(N)} = \gamma_1\gamma_2\cdots\gamma_N, \qquad \left(\gamma_\chi^{(N)}\right)^2 = (-1)^{N(N-1)/2}\ \mathbf{1} \tag{9.58}$$

当 N 是奇数时, $\gamma_\chi^{(N)}$ 可与所有 γ_a 矩阵对易, 由舒尔定理, 它是常数矩阵

$$\gamma_\chi^{(N)} = \begin{cases} \pm\mathbf{1}, & \text{当}\ \ N = 4m+1 \\ \pm\mathrm{i}\mathbf{1}, & \text{当}\ \ N = 4m-1 \end{cases} \tag{9.59}$$

这样, 当 $N = 4m+1$ 时, $\gamma_\chi^{(N)}$ 不是一个新元素, 它等于恒元 $\mathbf{1}$, 或者等于 $-\mathbf{1} = \gamma_1\gamma_2\gamma_1\gamma_2$. 这造成两个后果. 第一, $\gamma_\chi^{(N)}$ 等于 $\mathbf{1}$ 和等于 $-\mathbf{1}$ 的两个矩阵群, 只要把其中一对元素 $\pm\gamma_a$ 交叉对应, 就互相同构, 例如

$$\gamma_a \longleftrightarrow \gamma_a', \qquad a < N, \qquad \gamma_N \longleftrightarrow -\gamma_N'$$

第二, 对于给定的 $\gamma_\chi^{(4m+1)}$, 矩阵 γ_{4m+1} 可以表达成其余 γ_a 矩阵的乘积. 因此, Γ_{4m+1} 群和 Γ_{4m} 群一样, 它们的所有元素都可表达成 $4m$ 个 γ_a 矩阵的乘积, 即这两个群同构. 当 $N = 4m-1$ 时, $\gamma_\chi^{(N)}$ 是一个新元素, 在不可约的真实表示中, 它等于恒元 $\mathbf{1}$ 和常数 i 或 −i 的乘积. 与上面一样, 正负号的不同选择产生的矩阵群是互相同构的. 如果我们把 i 作为一个群元素引入, 则 Γ_{4m-1} 群的元素都可表成 Γ_{4m-2} 群的元素, 及其与元素 i 的乘积, 即

$$\Gamma_{4m+1} \approx \Gamma_{4m}, \qquad \Gamma_{4m-1} \approx \{\Gamma_{4m-2},\ \mathrm{i}\Gamma_{4m-2}\} \tag{9.60}$$

下面我们将重点研究 $N = 2\ell$ 是偶数的情况, 只在最后一小节专门讨论 N 是奇数的情况.

首先, 计算 $\Gamma_{2\ell}$ 矩阵群的元素数目 $g^{(2\ell)}$. 设 S_n 是 n 个不同下标的 γ_a 矩阵的乘积, 这样的元素数目为

$$2\begin{pmatrix} 2\ell \\ n \end{pmatrix} = 2\,\frac{(2\ell)!}{n!(2\ell-n)!}$$

前面的因子 2 表示每一种乘积都有正负成对的两个元素. n 的取值范围由零至 2ℓ, 零个 γ_a 矩阵乘积就是恒元, 2ℓ 个 γ_a 矩阵乘积就是 $\gamma_\chi^{(2\ell)}$, 因而 $\Gamma_{2\ell}$ 矩阵群的阶为

$$g^{(2\ell)} = 2\sum_{n=0}^{2\ell}\begin{pmatrix} 2\ell \\ n \end{pmatrix} = 2(1+1)^{2\ell} = 2^{2\ell+1} \tag{9.61}$$

其中, 组合数正是二项式的展开系数.

其次, 根据元素自身表示的特征标来确定 γ_a 矩阵的维数 $d^{(2\ell)}$. 除了 $\pm\mathbf{1}$ 外, $\Gamma_{2\ell}$ 矩阵群中任何元素 S_n, 都能找到另一个元素与它反对易. 事实上, 当 n 是偶数时, 参与 S_n 乘积的每一个 γ_a 矩阵都与 S_n 反对易, 当 n 是奇数时, 必定存在不参与 S_n 乘积的 γ_a 矩阵, 它与 S_n 反对易. 现设 γ_a 矩阵与 S_n 矩阵反对易, 则

$$\mathrm{Tr}\ S_n = \mathrm{Tr}\left(\gamma_a^2 S_n\right) = -\mathrm{Tr}\left(\gamma_a S_n \gamma_a\right) = -\mathrm{Tr}\ S_n = 0$$

因此 $\Gamma_{2\ell}$ 矩阵群中元素 S 在自身表示中的特征标为

$$\chi(S)=\begin{cases}\pm d^{(2\ell)}, & \text{当 } S=\pm\mathbf{1}\\ 0, & \text{当 } S\neq\pm\mathbf{1}\end{cases}\tag{9.62}$$

由于自身表示是不可约表示

$$2\left(d^{(2\ell)}\right)^2=\sum_{S\in\Gamma_{2\ell}}|\chi(S)|^2=g^{(2\ell)}=2^{2\ell+1}\ ,$$

$$d^{(2\ell)}=2^\ell\ .\tag{9.63}$$

第三, $\gamma_\chi^{(2\ell)}$ 矩阵可与所有 γ_a 矩阵都反对易, 如果再乘一个适当的系数, 可使它也变成自逆的, 从而与其他 γ_a 矩阵处于平等地位. 引入 $\gamma_f^{(2\ell)}$ 矩阵

$$\gamma_f^{(2\ell)}=(-\mathrm{i})^\ell\gamma_\chi^{(2\ell)}=(-\mathrm{i})^\ell\gamma_1\gamma_2\cdots\gamma_{2\ell},\qquad\left(\gamma_f^{(2\ell)}\right)^2=\mathbf{1}\tag{9.64}$$

实际上, 这 $\gamma_f^{(2\ell)}$ 可以定义为 $\gamma_{2\ell+1}$ 矩阵, 从而确定 $\Gamma_{2\ell+1}$ 矩阵群.

第四, 集合 $\Gamma'_{2\ell}$ 中的矩阵都是线性无关的. 如若不然, 存在如下线性关系

$$\sum_{S\in\Gamma'_{2\ell}}C(S)S=0$$

乘 $R^{-1}/d^{(2\ell)}$ 后取迹, 得 $C(R)=0$, 即所有系数为零. 集合 $\Gamma'_{2\ell}$ 包含了 $2^{2\ell}$ 个线性无关的 $d^{(2\ell)}=2^\ell$ 维矩阵, 因而它们构成完备基, 任何 $d^{(2\ell)}$ 维矩阵 M 都可按 $S\in\Gamma'_{2\ell}$ 展开

$$M=\sum_{S\in\Gamma'_{2\ell}}C(S)S,\qquad C(S)=\frac{1}{d^{(2\ell)}}\mathrm{Tr}\left(S^{-1}M\right)\tag{9.65}$$

第五, 讨论 $\Gamma_{2\ell}$ 矩阵群的类. 因为不同的 γ_a 矩阵互相反对易, 所以 $\pm S$ 两个矩阵构成一类, $\mathbf{1}$ 和 $-\mathbf{1}$ 分别构成一类, $\Gamma_{2\ell}$ 矩阵群有 $2^{2\ell}+1$ 个类.

很容易构造出 $\Gamma_{2\ell}$ 群 $2^{2\ell}$ 个不等价的一维表示: 让 n 个 γ_a 对应 1, 其余 $2\ell-n$ 个 γ_b 对应 -1, 就得到一个一维表示, 不同取法的表示不等价. n 的取值范围是由零至 2ℓ, 共有

$$\sum_{n=0}^{2\ell}\begin{pmatrix}2\ell\\ n\end{pmatrix}=2^{2\ell}$$

个. 在这些一维表示中, 元素 $-\mathbf{1}=\gamma_1\gamma_2\gamma_1\gamma_2$ 的表示矩阵是 1, 因而一维表示都是 $\Gamma_{2\ell}$ 群的非真实表示. 现在 $\Gamma_{2\ell}$ 群只剩下一个不等价不可约表示, 它是 $d^{(2\ell)}$ 维的真实表示. 在此表示中的 γ_a 矩阵称为不可约 γ_a 矩阵, 这里给出它们的具体形式.

γ_a 矩阵是无迹厄米兼幺正矩阵, 可以写成 ℓ 个二维矩阵的直乘, 这些二维矩阵取泡利矩阵 σ_a 和单位矩阵 $\mathbf{1}$. 通常选取表象, 使 $\gamma_f^{(2\ell)}$ 对角化, 称为约化旋量表象. 但对角化的 $\gamma_f^{(2\ell)}$ 还有很多不同的选择. 这里介绍一种常用的表象.

$$\begin{aligned}
\gamma_{2n-1} &= \underbrace{\mathbf{1}\times\ldots\times\mathbf{1}}_{n-1}\times\sigma_1\times\underbrace{\sigma_3\times\ldots\times\sigma_3}_{\ell-n}\ ,\\
\gamma_{2n} &= \underbrace{\mathbf{1}\times\ldots\times\mathbf{1}}_{n-1}\times\sigma_2\times\underbrace{\sigma_3\times\ldots\times\sigma_3}_{\ell-n}\ ,\\
\gamma_f^{(2\ell)} &= \underbrace{\sigma_3\times\ldots\times\sigma_3}_{\ell}\ ,\\
C^{(4m)} &= \underbrace{(\sigma_1\times\sigma_2)\times(\sigma_1\times\sigma_2)\times\ldots\times(\sigma_1\times\sigma_2)}_{m}\ ,\\
C^{(4m+2)} &= \sigma_2\times C^{(4m)}
\end{aligned}\tag{9.66}$$

这表象形式对称, 但 $\gamma_f^{(2\ell)}$ 的对角元 1 和 -1 混杂排列, 没有完全分开.

定理一 (等价定理)　$N=2\ell$ 为偶数时, 满足反对易的关系 (9.56) 的 $d^{(2\ell)}$ 维 γ_a 矩阵必等价

$$\overline{\gamma}_a = X^{-1}\gamma_a X,\qquad 1\leqslant a\leqslant 2\ell\tag{9.67}$$

证明　可以用两种方法证明此定理. 一是用特征标方法证明. 由这些 γ_a 矩阵乘积构成的 $\Gamma_{2\ell}$ 矩阵群表示, 特征标必满足式 (9.62), 因而表示互相等价. 二是根据 $\Gamma_{2\ell}$ 矩阵群只有一个不等价不可约真实表示, 因而 $d^{(2\ell)}$ 维真实表示都等价. 证完.

推论　两组 $d^{(2\ell)}$ 维不可约 γ_a 矩阵间的相似变换矩阵, 精确到一个常系数, 是唯一的. 如果限制相似变换矩阵的行列式为 1, 则此常系数只能取 $d^{(2\ell)}$ 个数 $\exp(-\mathrm{i}2n\pi/d^{(2\ell)})$, $0\leqslant n<d^{(2\ell)}$.

证明　设另有相似变换 Y

$$\overline{\gamma}_a = Y^{-1}\gamma_a Y$$

与式 (9.67) 比较知, YX^{-1} 可与所有 γ_a 矩阵对易, 因而是常数矩阵, $Y=cX$. 证完.

最后指出, γ_a 矩阵是无迹厄米兼幺正矩阵, 故本征值只能取 ±1, 且两种本征值数目相等, 于是

$$\det\gamma_a = (-1)^{2^{\ell-1}}\tag{9.68}$$

当 $\ell>1$ 时, γ_a 矩阵的行列式为 1.

二、电荷共轭变换矩阵

对 N 个不可约 γ_a 矩阵, 定义

$$\overline{\gamma}_a = -\left(\gamma_a\right)^T\tag{9.69}$$

其中, 上标 T 表矩阵取转置, 显然 $\overline{\gamma}_a$ 也满足反对易关系 (9.56), 因而 $\overline{\gamma}_a$ 和 γ_a 等价, 它们可通过幺模幺正相似变换 $C^{(2\ell)}$ 相联系

$$\left(C^{(2\ell)}\right)^{-1}\gamma_a C^{(2\ell)}=-\left(\gamma_a\right)^T,\qquad \left(C^{(2\ell)}\right)^{\dagger}C^{(2\ell)}=\mathbf{1},\qquad \det C^{(2\ell)}=1 \tag{9.70}$$

由此可得

$$\left(C^{(2\ell)}\right)^{-1}\gamma_f^{(2\ell)}C^{(2\ell)}=(-\mathrm{i})^{\ell}\left(\gamma_1\right)^T\left(\gamma_2\right)^T\cdots\left(\gamma_{2\ell}\right)^T=(-1)^{\ell}\left(\gamma_f^{(2\ell)}\right)^T \tag{9.71}$$

式 (9.70) 取转置, 有

$$\gamma_a=-\left(C^{(2\ell)}\right)^T\gamma_a^T\left[\left(C^{(2\ell)}\right)^{-1}\right]^T=\left[\left(C^{(2\ell)}\right)^T\left(C^{(2\ell)}\right)^{-1}\right]\gamma_a\left[\left(C^{(2\ell)}\right)^T\left(C^{(2\ell)}\right)^{-1}\right]^{-1}$$

即 $\left(C^{(2\ell)}\right)^T\left(C^{(2\ell)}\right)^{-1}=\lambda^{(2\ell)}\mathbf{1}$, $\left(C^{(2\ell)}\right)^T=\lambda^{(2\ell)}C^{(2\ell)}$, 因而

$$C^{(2\ell)}=\lambda^{(2\ell)}\left(C^{(2\ell)}\right)^T=\left(\lambda^{(2\ell)}\right)^2C^{(2\ell)},\qquad \lambda^{(2\ell)}=\pm 1$$

为了确定此参数 $\lambda^{(2\ell)}$, 取 n 个不同的 γ_a 矩阵的乘积 S_n, 得

$$\left(S_nC^{(2\ell)}\right)^T=\lambda^{(2\ell)}C^{(2\ell)}\left(S_n\right)^T=\lambda^{(2\ell)}(-1)^{n(n+1)/2}\left(S_nC^{(2\ell)}\right) \tag{9.72}$$

$S_nC^{(2\ell)}$ 是对称或反对称矩阵. 由于集合 $\Gamma'_{2\ell}$ 中的矩阵构成 $d^{(2\ell)}$ 维矩阵的完备基, 这些元素乘 $C^{(2\ell)}$ 后仍是完备基. 我们已经知道, 这样的矩阵 $S_nC^{(2\ell)}$ 的个数是 2ℓ 个数中取 n 个数的组合数, 它随 n 增加, 先增加后减少. 根据对称矩阵必须多于反对称矩阵的条件, 在 $n=\ell=N/2$ 时 $S_nC^{(2\ell)}$ 必须是对称矩阵, 即

$$\left(C^{(2\ell)}\right)^T=\lambda^{(2\ell)}C^{(2\ell)},\qquad \lambda^{(2\ell)}=(-1)^{\ell(\ell+1)/2} \tag{9.73}$$

在相对论量子力学中, $C^{(2\ell)}$ 矩阵和电荷共轭变换相联系, 称为电荷共轭变换矩阵. 还有一个与时空反演变换有关的变换矩阵 $B^{(2\ell)}$, 满足

$$\left(B^{(2\ell)}\right)^{-1}\gamma_aB^{(2\ell)}=\left(\gamma_a\right)^T,\qquad \left(B^{(2\ell)}\right)^{\dagger}B^{(2\ell)}=\mathbf{1},\qquad \det B^{(2\ell)}=1 \tag{9.74}$$

$$B^{(2\ell)}=\gamma_f^{(2\ell)}C^{(2\ell)} \tag{9.75}$$

由此

$$\left(B^{(2\ell)}\right)^T=\lambda^{(2\ell)}C^{(2\ell)}\left(\gamma_f^{(2\ell)}\right)^T=\tau^{(2\ell)}B^{(2\ell)},\qquad \tau^{(2\ell)}=(-1)^{\ell(\ell-1)/2} \tag{9.76}$$

在 $N=4$ 时

$$\left(C^{(4)}\right)^T=-C^{(4)},\qquad \left(B^{(4)}\right)^T=-B^{(4)} \tag{9.77}$$

$\Gamma_{2\ell}$ 矩阵群的阶数 $g^{(2\ell)}$, 矩阵维数 $d^{(2\ell)}$, $C^{(2\ell)}$ 矩阵和 $B^{(2\ell)}$ 矩阵的对称参数 $\lambda^{(2\ell)}$ 和 $\tau^{(2\ell)}$ 列于表 9.1.

表 9.1　$\Gamma_{2\ell}$ 群若干参数

$N=2\ell$	2	4	6	8	10	12	14	16
矩阵维数 $d^{(2\ell)}$	2	4	8	16	32	64	128	256
群阶数 $g^{(2\ell)}$	8	32	128	512	2048	8192	32768	131072
$\lambda^{(2\ell)}$	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1
$\tau^{(2\ell)}$	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1

$d^{(2\ell)}=2^{\ell},\quad g^{(2\ell)}=2^{2\ell+1},\quad \left(C^{(2\ell)}\right)^T=\lambda^{(2\ell)}C^{(2\ell)},\quad \left(B^{(2\ell)}\right)^T=\tau^{(2\ell)}B^{(2\ell)}.$

三、N 为奇数的情况

现在, 我们讨论 $N=2\ell+1$ 为奇数的情况. 首先, 讨论 γ 矩阵的形式. $\Gamma_{2\ell}$ 矩阵群中包含 2ℓ 个 γ_a 矩阵和一个 $\gamma_f^{(2\ell)}$ 矩阵, 它们满足式 (9.56), 可以作为 $\Gamma_{2\ell+1}$ 矩阵群的 $2\ell+1$ 个 γ_a 矩阵的定义

$$\gamma_{2\ell+1}=\gamma_f^{(2\ell)},\qquad \gamma_\chi^{(2\ell+1)}=\gamma_1\cdots\gamma_{2\ell+1}=(\mathrm{i})^{\ell}\mathbf{1} \tag{9.78}$$

这里已选定了 $\gamma_\chi^{(2\ell+1)}$ 矩阵的符号. 显然 $\Gamma_{2\ell+1}$ 与 $\Gamma_{2\ell}$ 矩阵群的矩阵维数相同

$$d^{(2\ell+1)}=d^{(2\ell)}=2^{\ell} \tag{9.79}$$

第二, 讨论等价定理. 当 N 是奇数时, 式 (9.59) 是元素乘积规则的一部分, 而且 $\mathbf{1}$ 和 $\mathrm{i}\mathbf{1}$ 在不可约表示中的表示矩阵是常数矩阵. 由于式 (9.60)Γ_{4m-1} 群与 Γ_{4m-2} 群相比, 元素增加一倍, 类数增加一倍, 因而不等价不可约表示个数也增加一倍. 改变式 (9.59) 的符号就是改变元素 "i" 表示矩阵的符号, 由此得到一组不等价的不可约表示. Γ_{4m+1} 群与 Γ_{4m} 群是同构的, 改变式 (9.59) 的符号就是改变元素 "$\pm\mathbf{1}$" 表示矩阵的符号, 作为表示这是不允许的. 总之, 当 N 是奇数时, 在等价定理的条件中, 除了条件式 (9.56), 还应加上 $\gamma_\chi^{(4m\pm1)}$ 和 $\overline{\gamma}_\chi^{(4m\pm1)}$ 相等的条件, 否则相似变换式 (9.67) 至少对一个 γ_a 矩阵不成立.

最后, 讨论电荷共轭变换矩阵 $C^{(N)}$. 对奇数 $N=2\ell+1$, 按式 (9.69) 引入 $\overline{\gamma}_a$ 时, 为了定义 $C^{(N)}$ 矩阵, 必须检验 $\gamma_\chi^{(2\ell+1)}$ 和 $\overline{\gamma}_\chi^{(2\ell+1)}$ 是否相等

$$\begin{aligned}\overline{\gamma}_\chi^{(2\ell+1)} &= \overline{\gamma}_1\cdots\overline{\gamma}_{2\ell+1}=-\left\{\gamma_{2\ell+1}\cdots\gamma_1\right\}^T\\ &= (-1)^{\ell+1}\left\{\gamma_\chi^{(2\ell+1)}\right\}^T=(-1)^{\ell+1}\gamma_\chi^{(2\ell+1)}\end{aligned} \tag{9.80}$$

可见满足式 (9.70) 的 $C^{(4m-1)}$ 是存在的, 而 $C^{(4m+1)}$ 不存在, 同理, 满足式 (9.74) 的

$B^{(4m-1)}$ 不存在, 而 $B^{(4m+1)}$ 是存在的. 由式 (9.71)、(9.73)、(9.75) 和 (9.76) 得

$$\begin{aligned} &C^{(4m-1)} = C^{(4m-2)}, &&\left(C^{(4m-1)}\right)^T = (-1)^m C^{(4m-1)} \\ &B^{(4m+1)} = B^{(4m)} = \gamma_f^{(4m)} C^{(4m)}, &&\left(B^{(4m+1)}\right)^T = (-1)^m B^{(4m+1)} \end{aligned} \tag{9.81}$$

矩阵 $C^{(4m-1)}$, $B^{(4m+1)}$, $C^{(4m-2)}$ 和 $C^{(4m)}$ 的对称性都一样, 转置后都产生因子 $(-1)^m$.

9.5 SO(N) 群的旋量表示

在这一节我们将深入研究 SO(N) 群旋量表示的性质.

一、SO(N) 群旋量表示的定义

对满足式 (9.56) 的 N 个不可约幺正 γ_a 矩阵, 定义

$$\overline{\gamma}_a = \sum_{b=1}^{N} R_{ab}\gamma_b, \qquad R \in \mathrm{SO}(N) \tag{9.82}$$

由于 R 是行列式为 1 的实正交矩阵, $\overline{\gamma}_a$ 满足

$$\begin{aligned} \overline{\gamma}_a\overline{\gamma}_b + \overline{\gamma}_b\overline{\gamma}_a &= \sum_{cd} R_{ac}R_{bd}\left\{\gamma_c\gamma_d + \gamma_d\gamma_c\right\} = 2\sum_{c} R_{ac}R_{bc}\mathbf{1} = 2\delta_{ab}\mathbf{1} , \\ \overline{\gamma}_1\overline{\gamma}_2\cdots\overline{\gamma}_N &= \sum_{a_1\cdots a_N} R_{1a_1}\cdots R_{Na_N}\gamma_{a_1}\gamma_{a_2}\cdots\gamma_{a_N} \\ &= \sum_{a_1\cdots a_N} R_{1a_1}\cdots R_{Na_N}\epsilon_{a_1\cdots a_N}\gamma_1\gamma_2\cdots\gamma_N \\ &= (\det\ R)\,\gamma_1\gamma_2\cdots\gamma_N = \gamma_1\gamma_2\cdots\gamma_N \end{aligned}$$

由于式 (9.56), 第一行求和式中的 a_j 互不相等, 例如

$$\sum_{a_1a_2} R_{1a_1}R_{2a_2}\gamma_{a_1}\gamma_{a_2} = \frac{1}{2}\sum_{a_1\neq a_2} R_{1a_1}R_{2a_2}\left(\gamma_{a_1}\gamma_{a_2} - \gamma_{a_2}\gamma_{a_1}\right) + \mathbf{1}\sum_{a_1a_2} R_{1a_1}R_{2a_2}\delta_{a_1a_2}$$

后项显然为零. 根据等价定理, $\overline{\gamma}_a$ 和 γ_a 可通过幺模幺正相似变换相联系. 这相似变换依赖于 R, 记作 $D(R)$

$$D(R)^{-1}\gamma_a D(R) = \sum_{b=1}^{N} R_{ab}\gamma_b \tag{9.83}$$

$D(R)$ 矩阵还允许相差常系数

$$\exp\left(-\mathrm{i}2n\,\pi\,/d^{(N)}\right), \qquad 0 \leqslant n < d^{(N)} \tag{9.84}$$

满足式 (9.83) 的 $D(R)$ 矩阵的集合, 按照矩阵乘积规则, 显然满足群的四个条件, 构成群 G'_N. 幺模幺正矩阵 $D(R)$ 通过相似变换关系 (9.83), 与 SO(N) 群元素 R 有 $d^{(N)}:1$ 的对应关系, 而且这种对应关系对元素乘积保持不变, 因而 SO(N) 群与 G'_N 同态. 既然 SO(N) 群的群空间是双连通的, 它与覆盖群的同态关系应该是 1 : 2 的对应关系, 可见 G'_N 群一定是混合李群, 群空间是不连通的. 群空间中包含恒元的那一连续片构成它的不变子群 G_N. G_N 群是简单李群, 它才是 SO(N) 群的覆盖群. 我们要找出一个不连续的条件, 把 G_N 群从 G'_N 群中区分出来. 找这条件的最好办法就是利用 G_N 群的连通性, 也就是利用 G_N 群的无穷小元素及其生成元.

设 R 是无穷小元素, R 和 $D(R)$ 矩阵可按无穷小参数 ω_{ab} 展开

$$\begin{aligned} R_{ab} &= \delta_{ab} - \mathrm{i}\sum_{c<d} \omega_{cd}\left(T_{cd}\right)_{ab} = \delta_{ab} - \omega_{ab} \\ D(R) &= \mathbf{1} - \mathrm{i}\sum_{c<d} \omega_{cd} S_{cd} \end{aligned} \tag{9.85}$$

其中, 用到 SO(N) 群自身表示的生成元 T_{ab} 的形式 (7.97). S_{cd} 是幺正表示 $D(R)$ 的生成元, 因而是厄米矩阵. 代入式 (9.83) 得

$$\begin{aligned} -\mathrm{i}\sum_{c<d} \omega_{cd}\left[\gamma_a,\ S_{cd}\right] &= -\sum_{d} \omega_{ad}\gamma_d \\ &= -\sum_{d>a} \omega_{ad}\gamma_d + \sum_{d<a} \omega_{da}\gamma_d = -\sum_{c<d} \omega_{cd}\left\{\delta_{ac}\gamma_d - \delta_{ad}\gamma_c\right\} \end{aligned}$$

即 S_{cd} 满足

$$\left[\gamma_a,\ S_{cd}\right] = -\mathrm{i}\left\{\delta_{ac}\gamma_d - \delta_{ad}\gamma_c\right\} \tag{9.86}$$

按照式 (9.65) 把 S_{cd} 展开成 S_n 的线性组合. S_n 是 n 个不同的 γ_a 矩阵的乘积, 代入式 (9.86) 取对易关系后, 必定得到由 $n \pm 1$ 个 γ_a 矩阵乘积的项, 为了满足式 (9.86), 必须 $n = 2$. 然后做简单运算, 可解得

$$S_{ab} = \frac{1}{4\mathrm{i}}\left(\gamma_a\gamma_b - \gamma_b\gamma_a\right) \tag{9.87}$$

S_{ab} 确实是厄米矩阵.

为了书写的符号统一, 定义

$$C = \begin{cases} B^{(N)}, & \text{当}\ N = 4m+1 \\ C^{(N)}, & \text{当}\ N \neq 4m+1 \end{cases} \tag{9.88}$$

则 $C^{-1}S_{ab}C = -\left(S_{ab}\right)^T = -S_{ab}^*$

$$C^{-1}D(R)C = \left\{D(R^{-1})\right\}^T = D(R)^* \tag{9.89}$$

不连续的条件式 (9.89) 限制了 $D(R)$ 矩阵前的可乘因子 [见式 (9.84)], 从而使 SO(N) 群元素 R, 通过式 (9.83) 和 (9.89), 与 $\pm D(R)$ 两个矩阵, 建立起一二对应的关系, 且这对应关系对元素乘积保持不变, 即 G_N 群是 SO(N) 群的覆盖群

$$\mathrm{SO}(N) \sim \mathrm{G}_N \tag{9.90}$$

G_N 群称为 SO(N) 群的基本旋量表示, 在不会引起混淆时常简称旋量表示, S_{ab} 称为自旋角动量算符. 今后把基本旋量表示表为 $D^{[s]}(\mathrm{SO}(N))$. 显然, 当 $N=3$ 时, G_3 群就是 SU(2) 群. SO(N) 群的不可约张量表示称为 SO(N) 群的单值表示, 它们是 G_N 群的非真实表示. G_N 群的真实表示, 称为 SO(N) 群的双值表示, 或称旋量表示.

二、基本旋量表示的不可约性

因为 γ_a 矩阵及其乘积 S_n 构成 $d^{(N)}$ 维矩阵的完备基, 所以逐个检验 S_n, 容易证明, 除了常数矩阵外, 只有 $\gamma_\chi^{(N)}$ 矩阵才能与基本旋量表示所有生成元 S_{ab} 对易. 当 $N=2\ell+1$ 是奇数时, $\gamma_\chi^{(2\ell+1)}$ 是常数矩阵, 因而奇数 N 的基本旋量表示是不可约表示. 由式 (9.89) 和 (9.81) 知, 奇数 N 的基本旋量表示是自共轭表示, 当 $N=8k\pm 1$ 时基本旋量表示是实表示.

当 $N=2\ell$ 是偶数时, $\gamma_\chi^{(2\ell)}$ 不是常数矩阵, 偶数 N 的基本旋量表示是可约表示. 由于所选用的表象式 (9.66), $\gamma_f^{(2\ell)}$ 表为 ℓ 个 σ_3 矩阵的乘积, 它是对角矩阵, 但本征值 ± 1 分散分布在不同行列. 可通过简单相似变换 X 把 $\gamma_f^{(2\ell)}$ 化成 $\sigma_3\times \mathbf{1}$ 形式, 从而把基本旋量表示约化为两个不可约表示的直和

$$X^{-1}D^{[s]}(R)X = \begin{pmatrix} D^{[+s]}(R) & 0 \\ 0 & D^{[-s]}(R) \end{pmatrix} \tag{9.91}$$

不难用反证法证明这两个子不可约表示 $D^{[\pm s]}(R)$ 是不等价的. 如若不然, 取相似变换 $Y=\mathbf{1}\times Z$ 把 $D^{[-s]}(R)$ 变成 $D^{[+s]}(R)$, 于是在新表象中, 所有生成元 $(XY)^{-1}S_{ab}XY$ 可与 $\sigma_1\times\mathbf{1}$ 对易, 但它们的乘积却不能与之对易. 事实上, 它们的乘积在这相似变换中保持不变

$$2^{\ell}(XY)^{-1}\left(S_{12}S_{34}\cdots S_{(2\ell-1)(2\ell)}\right)XY = Y^{-1}\left[X^{-1}\gamma_f^{(2\ell)}X\right]Y = \sigma_3\times\mathbf{1}$$

这显然是矛盾的. 这两个旋量表示 $D^{[\pm s]}$ 常称不可约基本旋量表示.

引入投影算符 $P_\pm$

$$P_\pm = \frac{1}{2}\left(\mathbf{1}\pm\gamma_f^{(2\ell)}\right),\quad X^{-1}P_+X = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},\quad X^{-1}P_-X = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{1} \end{pmatrix} \tag{9.92}$$

经过 $P_\pm$ 的投影

$$
\begin{aligned}
X^{-1}P_+D^{[s]}(R)X = X^{-1}D^{[s]}(R)P_+X &= \begin{pmatrix} D^{[+s]}(R) & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
X^{-1}P_-D^{[s]}(R)X = X^{-1}D^{[s]}(R)P_-X &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & D^{[-s]}(R) \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{9.93}
$$

根据式 (9.71) 和 (9.89), 得

$$
C^{-1}D^{[s]}(R)P_\pm C = \begin{cases} D^{[s]}(R)^*P_\pm, & 当\ N=4m \\ D^{[s]}(R)^*P_\mp, & 当\ N=4m+2 \end{cases} \tag{9.94}
$$

当 $N=4m+2$ 时, $D^{[\pm s]}(R)$ 互为复共轭表示, 当 $N=4m$ 时, $D^{[\pm s]}(R)$ 是不等价的自共轭表示, 当 $N=8k$ 时, $D^{[\pm s]}(R)$ 是不等价的实表示. SO(N) 群不可约旋量表示的维数为

$$
d_{[s]}[\mathrm{SO}(2\ell+1)] = 2^{\ell}, \qquad d_{[\pm s]}[\mathrm{SO}(2\ell)] = 2^{\ell-1} \tag{9.95}
$$

三、SO(N) 群的基本旋量

有 $d^{(N)}$ 个分量, 在 SO(N) 变换中按下述规律变换的量 Ψ_μ, 称为 SO(N) 群的基本旋量, 简称旋量

$$
(O_R\Psi)_\mu = \sum_\nu D^{[s]}_{\mu\nu}(R)\Psi_\nu, \qquad O_R\Psi = D^{[s]}(R)\Psi \tag{9.96}
$$

由于所选用的表象式 (9.77), 当 $N=2\ell$ 或 $2\ell+1$ 时, γ_a 矩阵表为 ℓ 个 σ 矩阵或二维单位矩阵的直乘, SO(N) 群基本旋量 Ψ 的基 W 最好也表为 ℓ 个二维旋量 $\chi(\alpha)$ 的直乘

$$
\begin{aligned}
&W(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_\ell) = \chi(\alpha_1)\chi(\alpha_2)\cdots\chi(\alpha_\ell), \\
&\chi(+) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \chi(-) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{9.97}
$$

当 $N=2\ell$ 时, P_+ 投影得到的子空间, 旋量基包含偶数个 $\chi(-)$ 因子, 这是 $[+s]$ 的表示空间, 而 P_- 投影得到的子空间, 旋量基包含奇数个 $\chi(-)$ 因子, 这是 $[-s]$ 的表示空间.

在生成元的谢瓦莱基式 (9.15) 和 (9.21) 中, 把 T_{ab} 换成 S_{ab}, 就得到自旋角动量的谢瓦莱基 $H_\mu(S)$, $E_\mu(S)$ 和 $F_\mu(S)$. 经过直接计算, 对 SO(2ℓ) 群 (D_ℓ 代数) 和

$\mathrm{SO}(2\ell+1)$ 群 (B_ℓ 代数), 有

$$\left.\begin{aligned} H_\mu(S) &= \underbrace{\mathbf{1}\times\cdots\times\mathbf{1}}_{\mu-1}\times\frac{1}{2}\left\{\sigma_3\times\mathbf{1}-\mathbf{1}\times\sigma_3\right\}\times\underbrace{\mathbf{1}\times\cdots\times\mathbf{1}}_{\ell-\mu-1}, \\ E_\mu(S) &= \underbrace{\mathbf{1}\times\cdots\times\mathbf{1}}_{\mu-1}\times\left\{\sigma_+\times\sigma_-\right\}\times\underbrace{\mathbf{1}\times\cdots\times\mathbf{1}}_{\ell-\mu-1}, \end{aligned}\right\} \begin{array}{l}\mathrm{SO}(2\ell)\text{和}\\ \mathrm{SO}(2\ell+1)\\ 1\leqslant\mu<\ell\end{array}$$

$$H_\ell(S) = \begin{cases} \underbrace{\mathbf{1}\times\cdots\times\mathbf{1}}_{\ell-2}\times\frac{1}{2}\left\{\sigma_3\times\mathbf{1}+\mathbf{1}\times\sigma_3\right\}, & \mathrm{SO}(2\ell) \\ \underbrace{\mathbf{1}\times\cdots\times\mathbf{1}}_{\ell-1}\times\sigma_3, & \mathrm{SO}(2\ell+1) \end{cases}$$

$$E_\ell(S) = \begin{cases} -\underbrace{\mathbf{1}\times\cdots\times\mathbf{1}}_{\ell-2}\times\left\{\sigma_+\times\sigma_+\right\}, & \mathrm{SO}(2\ell) \\ \underbrace{\sigma_3\times\cdots\times\sigma_3}_{\ell-1}\times\sigma_+, & \mathrm{SO}(2\ell+1) \end{cases} \tag{9.98}$$

把升算符 $E_\mu(S)$ 中的 $\sigma_\pm$ 换成 $\sigma_\mp$, 就得到降算符 $F_\mu(S)$. $\sigma_\pm$ 作用在 $\chi(\pm)$ 上得零, 作用在 $\chi(\mp)$ 上得 $\chi(\pm)$. 四维对角矩阵 $\{\sigma_3\times\mathbf{1}-\mathbf{1}\times\sigma_3\}/2$ 作用在 $\chi(+)\chi(-)$ 上得 1, 作用在 $\chi(-)\chi(+)$ 上得 -1, 作用在其他态上得零. 四维对角矩阵 $\{\sigma_3\times\mathbf{1}+\mathbf{1}\times\sigma_3\}/2$ 作用在 $\chi(+)\chi(+)$ 上得 1, 作用在 $\chi(-)\chi(-)$ 上得 -1, 作用在其他态上得零.

由式 (9.98), 各基本不可约旋量表示的最高权态及其最高权 $\boldsymbol{M}$ 为

$$\begin{array}{lll} \underbrace{\chi(+)\cdots\chi(+)}_{\ell-1}\chi(+), & \boldsymbol{M}=(\underbrace{0,\cdots,0}_{\ell-1},1), & \mathrm{SO}(2\ell+1)\ \text{群表示}\ [s] \\ \underbrace{\chi(+)\cdots\chi(+)}_{\ell-1}\chi(+), & \boldsymbol{M}=(\underbrace{0,\cdots,0}_{\ell-2},0,1), & \mathrm{SO}(2\ell)\ \text{群表示}\ [+s] \\ \underbrace{\chi(+)\cdots\chi(+)}_{\ell-1}\chi(-), & \boldsymbol{M}=(\underbrace{0,\cdots,0}_{\ell-2},1,0), & \mathrm{SO}(2\ell)\ \text{群表示}\ [-s] \end{array} \tag{9.99}$$

表示中的其他状态可用降算符 $F_\mu(S)$ 作用得到.

四、SO(N) 群基本旋量表示的直乘分解

因为旋量表示是幺正的, 所以

$$O_R\Psi^\dagger = \Psi^\dagger D^{[s]}(R)^{-1}, \tag{9.100}$$

$$\begin{aligned} \Psi^\dagger\Psi &= \sum_\mu \Psi_\mu^*\Psi_\mu = \sum_{\mu\nu}\Psi_\mu^*\delta_{\mu\nu}\Psi_\nu, \\ O_R\left(\Psi^\dagger\Psi\right) &= \Psi^\dagger D^{[s]}(R)^{-1}D^{[s]}(R)\Psi = \Psi^\dagger\Psi \end{aligned} \tag{9.101}$$

$\Psi^\dagger\Psi$ 构成 $\mathrm{SO}(N)$ 变换的不变量, 即标量. 按群论的一般理论, 由 Ψ_μ^* 和 Ψ_ν 乘积的线性组合, 架设 $\mathrm{SO}(N)$ 群的不变空间, 对应表示 $D^{[s]*}\times D^{[s]}$, 它一般是 $\mathrm{SO}(N)$ 群的

可约表示, 可以找出相应的克莱布施 - 戈登级数和克莱布施 - 戈登系数. 式 (9.101) 指出, 在此克莱布施 - 戈登级数中包含恒等表示, 而且给出了克莱布施 - 戈登系数为 $\delta_{\mu\nu}$. 把这思想推广, 由于

$$\begin{aligned} O_R\left(\Psi^\dagger\gamma_{a_1}\cdots\gamma_{a_n}\Psi\right) &= \Psi^\dagger D^{[s]}(R)^{-1}\gamma_{a_1}\cdots\gamma_{a_n}D^{[s]}(R)\Psi \\ &= \sum_{b_1\cdots b_n} R_{a_1b_1}\cdots R_{a_nb_n}\Psi^\dagger\gamma_{b_1}\cdots\gamma_{b_n}\Psi \end{aligned} \tag{9.102}$$

这样的组合构成 SO(N) 群的 n 阶反对称张量, 对应杨图 $[1^n]$. n 显然不大于 N, 否则必有重复的 γ 矩阵, 它们可以移到一起并消去, 不构成新的张量.

当 $N=2\ell+1$ 是奇数时, 由于 $\gamma_f^{(2\ell+1)}$ 是常数矩阵, n 个 γ 矩阵的乘积可以化为 $N-n$ 个 γ 矩阵的乘积. 因此式 (9.102) 给出的张量阶数 $n<N/2$, 即克莱布施 - 戈登级数为

$$[s]^*\times[s]\simeq[s]\times[s]\simeq\ [0]\oplus[1]\oplus[1^2]\oplus\cdots\oplus[1^\ell] \tag{9.103}$$

式 (9.102) 中的 γ 矩阵乘积的矩阵元素就是相应的克莱布施 - 戈登系数. 从最高权的观点来看, 由式 (9.99), $[s]\times[s]$ 直乘空间中状态的最高权为 $\boldsymbol{M}=(0,\cdots,0,2)$, 它正是张量表示 $[1^\ell]$ 的最高权 [见式 (9.18)].

当 $N=2\ell$ 是偶数时, 应用投影算符 $P_\pm$ 的性质

$$\begin{aligned} &P_+P_-=P_-P_+=0, \qquad P_\pm P_\pm=P_\pm, \qquad \gamma_f^{(2\ell)}P_\pm=\pm P_\pm, \\ &P_\mp\gamma_{a_1}\cdots\gamma_{a_{2n}}P_\pm=0, \qquad P_\pm\gamma_{a_1}\cdots\gamma_{a_{2n+1}}P_\pm=0 \end{aligned} \tag{9.104}$$

由 $P_\pm\Psi$ 可以构成如下非零张量

$$\begin{aligned} &\Psi^\dagger P_\pm\gamma_{a_1}\cdots\gamma_{a_{2n}}P_\pm\Psi, \qquad 2n\leqslant\ell\ , \\ &\Psi^\dagger P_\mp\gamma_{a_1}\cdots\gamma_{a_{2n+1}}P_\pm\Psi, \qquad 2n+1\leqslant\ell \end{aligned} \tag{9.105}$$

当 γ 矩阵数目超过 ℓ 时, 仍可用乘 $\gamma_f^{(2\ell)}$ 矩阵的办法化为数目少于 ℓ 个 γ 矩阵的乘积. 这时虽然 $\gamma_f^{(2\ell)}$ 矩阵不是常数矩阵, 但它乘在 $P_\pm$ 上只相当一个正负号. 对 ℓ 个 γ 矩阵的乘积, 比较式 (9.10) 知, 它们分别对应自对偶和反自对偶组合

$$\begin{aligned} &\gamma_1\gamma_2\cdots\gamma_\ell=\mathrm{i}^\ell\gamma_f^{(2\ell)}\gamma_{2\ell}\gamma_{2\ell-1}\cdots\gamma_{\ell+1}=(-\mathrm{i})^\ell\gamma_{2\ell}\gamma_{2\ell-1}\cdots\gamma_{\ell+1}\gamma_f^{(2\ell)} \\ &\gamma_1\gamma_2\cdots\gamma_\ell P_\pm=\frac{1}{2}\ \left\{\gamma_1\gamma_2\cdots\gamma_\ell\pm(-\mathrm{i})^\ell\gamma_{2\ell}\gamma_{2\ell-1}\cdots\gamma_{\ell+1}\right\}P_\pm \end{aligned} \tag{9.106}$$

从最高权的观点来看, 由式 (9.99), 当 $N=2\ell$ 时, 各不可约基本旋量表示直乘空间所包含的状态的最高权 $\boldsymbol{M}$ 和相应的张量表示如表 9.2.

表 9.2

表示直乘	最高权	张量表示
$[+s]\times[+s]$	$\boldsymbol{M}=(\underbrace{0,\cdots,0}_{\ell-2},0,2)$	$[(S)1^{\ell}]$
$[-s]\times[-s]$	$\boldsymbol{M}=(\underbrace{0,\cdots,0}_{\ell-2},2,0)$	$[(A)1^{\ell}]$
$[+s]\times[-s]$	$\boldsymbol{M}=(\underbrace{0,\cdots,0}_{\ell-2},1,1)$	$[1^{\ell-1}]$

再注意式 (9.94) 和 (9.10), 当 $N=4m$ 时

$$\begin{aligned}&[\pm s]^*\times[\pm s]\simeq[\pm s]\times[\pm s]\simeq[0]\oplus[1^2]\oplus[1^4]\oplus\cdots\oplus\left\{\begin{array}{l}[(S)1^{2m}]\\ [(A)1^{2m}]\end{array}\right.\\ &[\mp s]^*\times[\pm s]\simeq[\mp s]\times[\pm s]\simeq[1]\oplus[1^3]\oplus[1^5]\oplus\cdots\oplus[1^{2m-1}]\end{aligned}\tag{9.107}$$

而当 $N=4m+2$ 时

$$\begin{aligned}&[\pm s]^*\times[\pm s]\simeq[\mp s]\times[\pm s]\simeq[0]\oplus[1^2]\oplus[1^4]\oplus\cdots\oplus[1^{2m}]\\ &[\mp s]^*\times[\pm s]\simeq[\pm s]\times[\pm s]\simeq[1]\oplus[1^3]\oplus[1^5]\oplus\cdots\oplus\left\{\begin{array}{l}[(S)1^{2m+1}]\\ [(A)1^{2m+1}]\end{array}\right.\end{aligned}\tag{9.108}$$

五、高阶旋量表示

对 SO(3) 群, $D^{1/2}$ 表示是基本旋量表示, 高阶旋量表示 D^j 可由基本旋量表示和张量表示直乘分解得到

$$D^{1/2}\times D^{\ell}\simeq D^{\ell+1/2}\oplus D^{\ell-1/2}\tag{9.109}$$

推广这一思想, 可研究 SO(N) 群的高阶旋量表示.

设旋量带有张量指标 $\boldsymbol{\Psi}_{a_1\cdots a_n}$, 它在 SO($N$) 变换中按下式变换

$$(O_R\boldsymbol{\Psi})_{a_1\cdots a_n}=\sum_{b_1\cdots b_n}R_{a_1b_1}\cdots R_{a_nb_n}D^{[s]}(R)\boldsymbol{\Psi}_{b_1\cdots b_n}\tag{9.110}$$

这样的量称为旋张量. 旋张量空间是可约的, 存在对 SO(N) 群的不变子空间. 先对旋张量的张量部分, 用去迹和杨算符投影的办法, 选出以行数不大于 $N/2$ 的杨图 $[\lambda]$ 标记的无迹张量空间. 这样的旋张量空间对应的表示是旋量表示 $[s]$ 和张量表示 $[\lambda]$ 的直乘. 它一般还是可约表示, 表示空间存在第二类迹旋张量构成的关于 SO(N) 变

换的不变子空间

$$\Phi_{a_1\cdots a_{i-1}a_{i+1}\cdots a_n}=\sum_{b=1}^{N}\gamma_b\Psi_{a_1\cdots a_{i-1}ba_{i+1}\cdots a_n},$$

$$\begin{aligned}(O_R\Phi)_{a_1\cdots a_{i-1}a_{i+1}\cdots a_n}&=\sum_{b_1\cdots b_n b'}R_{a_1b_1}\cdots R_{a_nb_n}\left[\sum_b\gamma_bR_{bb'}\right]D^{[s]}(R)\Psi_{b_1\cdots b_{i-1}b'b_{i+1}\cdots b_n}\\&=\sum_{b_1\cdots b_n}R_{a_1b_1}\cdots R_{a_nb_n}D^{[s]}(R)\left[\sum_{b'}\gamma_{b'}\Psi_{b_1\cdots b_{i-1}b'b_{i+1}\cdots b_n}\right]\\&=\sum_{b_1\cdots b_n}R_{a_1b_1}\cdots R_{a_nb_n}D^{[s]}(R)\Phi_{b_1\cdots b_{i-1}b_{i+1}\cdots b_n}\end{aligned}$$

因此存在旋张量的第二类无迹条件

$$\sum_{b=1}^{N}\gamma_b\Psi_{a_1\cdots a_{i-1}ba_{i+1}\cdots a_n}=0 \tag{9.111}$$

旋张量可以按照此第二类无迹条件, 分解为无迹旋张量和迹旋张量之和, 分别对 SO(N) 变换保持不变. 对迹旋张量的剩余指标还可以继续去迹. 这种分解就是直乘表示 $[s]\times[\lambda]$ 的分解. 表示空间中阶数最高的无迹旋张量所对应的表示最高权 $\boldsymbol{M}$ 等于表示 $[s]$ 和 $[\lambda]$ 最高权之和, 用行数不大于 $N/2$ 的杨图 $[\lambda]$ 前面加 s 或 $\pm s$ 标记: N 是奇数时, 标记为 $[s(\lambda)]$, N 是偶数时, 标记为 $[+s(\lambda)]$ 或 $[-s(\lambda)]$. 最高权 $\boldsymbol{M}$ 和杨图的关系如表 9.3 所示.

表 9.3

N	表示直乘	最高权	表示
$2\ell+1$	$[s]\times[\lambda]$	$\boldsymbol{M}=[(\lambda_1-\lambda_2),\cdots,(\lambda_{\ell-1}-\lambda_\ell),(2\lambda_\ell+1)]$	$[s(\lambda)]$
2ℓ	$[+s]\times[(S)\lambda]$	$\boldsymbol{M}=[(\lambda_1-\lambda_2),\cdots,(\lambda_{\ell-1}-\lambda_\ell),(\lambda_{\ell-1}+\lambda_\ell+1)]$	$[+s(\lambda)]$
2ℓ	$[-s]\times[(A)\lambda]$	$\boldsymbol{M}=[(\lambda_1-\lambda_2),\cdots,(\lambda_{\ell-1}+\lambda_\ell+1),(\lambda_{\ell-1}-\lambda_\ell)]$	$[-s(\lambda)]$

若 $\lambda_\ell=0$, 上表所列最高权及其杨图标记仍成立. 当 $N=2\ell$ 时, 在直乘空间 $[+s]\times[(A)\lambda]$ 和 $[-s]\times[(S)\lambda]$ 所包含状态的最高权及其对应杨图分别为

$$\begin{aligned}&[+s]\times[(A)\lambda]:\\&[(\lambda_1-\lambda_2),\cdots,(\lambda_{\ell-1}+\lambda_\ell),(\lambda_{\ell-1}-\lambda_\ell+1)],\qquad[-s(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_{\ell-1},\lambda_\ell-1)],\\&[-s]\times[(S)\lambda]:\\&[(\lambda_1-\lambda_2),\cdots,(\lambda_{\ell-1}-\lambda_\ell+1),(\lambda_{\ell-1}+\lambda_\ell)],\qquad[+s(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_{\ell-1},\lambda_\ell-1)]\end{aligned} \tag{9.112}$$

克莱布施 – 戈登级数中包含的其他表示则需通过主权图方法计算. 若旋张量的张量部分是一行或一列的杨图, 则当 $N=2\ell+1$ 时, 有

$$\begin{aligned}&[s]\times[\lambda_1,0,\cdots,0]\simeq[s(\lambda_1,0,\cdots,0)]\oplus[s(\lambda_1-1,0,\cdots,0)],\\&[s]\times[1^n]\simeq[s(1^n)]\oplus[s(1^{n-1})]\oplus\cdots\oplus[s],\qquad n\leqslant\ell\end{aligned} \tag{9.113}$$

当 $N=2\ell$ 时, 有

$$
\begin{aligned}
&[\pm s]\times[\lambda_1,0,\cdots,0]\simeq[\pm s(\lambda_1,0,\cdots,0)]\oplus[\mp s(\lambda_1-1,0,\cdots,0)]\,,\\
&[\pm s]\times[1^n]\simeq[\pm s(1^n)]\oplus[\mp s(1^{n-1})]\oplus[\pm s(1^{n-2})]\oplus\cdots,\qquad n<\ell\,,\\
&[+s]\times[(S)1^\ell]\simeq[+s(1^\ell)]\oplus[-s(1^{\ell-2})]\oplus[+s(1^{\ell-4})]\oplus\cdots\,,\\
&[-s]\times[(A)1^\ell]\simeq[-s(1^\ell)]\oplus[+s(1^{\ell-2})]\oplus[-s(1^{\ell-4})]\oplus\cdots\,,\\
&[+s]\times[(A)1^\ell]\simeq[-s(1^{\ell-1})]\oplus[+s(1^{\ell-3})]\oplus[-s(1^{\ell-5})]\oplus\cdots\,,\\
&[-s]\times[(S)1^\ell]\simeq[+s(1^{\ell-1})]\oplus[-s(1^{\ell-3})]\oplus[+s(1^{\ell-5})]\oplus\cdots
\end{aligned}
\tag{9.114}
$$

最后强调一下, 高阶旋量表示的杨图行数不能大于 $N/2$, 否则是零空间. 以 $N=2\ell+1$ 情况的高阶旋量表示 $[s(1^n)]$ 为例来说明. 因为张量指标反对称, 所以不存在第一类无迹条件. 在取第二类无迹条件前, 旋张量空间维数为 $d^{(N)}$ 乘 N 个数中取 n 个数的组合, 而第二类无迹条件个数为 $d^{(N)}$ 乘 N 个数中取 $n-1$ 个数的组合. 空间维数必须大于无迹条件个数, 即 $n\leqslant N/2$.

六、高阶旋量表示的维数

可以根据杨图, 用钩形规则来计算 SO(N) 群高阶旋量表示 $[s(\lambda)]$ 的维数, 其中杨图 $[\lambda]$ 行数不大于 $N/2$. 在这规则中, 表示维数表为一个分数, 分子和分母分别为给定杨图 $[\lambda]$ 的一定表中所有填数的乘积, 前面还要乘上不可约基本旋量表示的维数

$$
\begin{aligned}
&d_{[s(\lambda)]}[\mathrm{SO}(2\ell+1)]=d_{[s]}[\mathrm{SO}(2\ell+1)]\ \frac{Y_S^{[\lambda]}}{Y_h^{[\lambda]}},\qquad d_{[s]}[\mathrm{SO}(2\ell+1)]=2^\ell,\\
&d_{[\pm s(\lambda)]}[\mathrm{SO}(2\ell)]=d_{[\pm s]}[\mathrm{SO}(2\ell)]\ \frac{Y_S^{[\lambda]}}{Y_h^{[\lambda]}},\qquad\quad d_{[\pm s]}[\mathrm{SO}(2\ell)]=2^{\ell-1}
\end{aligned}
\tag{9.115}
$$

仍沿用以前关于钩形路径和逆钩形路径的定义. 杨图 $[\lambda]$ 的钩形路径 $(i,\ j)$ 是一条钩形通道, 由杨图 $[\lambda]$ 第 i 行最右面格子处进入杨图, 向左走到第 i 行第 j 列处向下转弯, 在第 j 列最下面格子处离开杨图. 而逆钩形路径 $\overline{(i,\ j)}$ 与钩形路径 $(i,\ j)$ 形状相同, 只是走向相反. 两条钩形路径在杨图中经过的格子数就是第 i 行第 j 列格子的钩形数 h_{ij}. 分母的表 $Y_h^{[\lambda]}$ 是在杨图 $[\lambda]$ 各格填以该格的构形数 h_{ij}, 分母是表中所填数的乘积. 对杨图 $[\lambda]$, 按下面规则相继定义一系列的表 $Y_{S_a}^{[\lambda]}$, 分子的表 $Y_S^{[\lambda]}$ 是在杨图 $[\lambda]$ 各格填以上述系列中各表 $Y_{S_a}^{[\lambda]}$ 对应格子填数之和, 分子是表 $Y_S^{[\lambda]}$ 中所填数的乘积.

表 $Y_{S_a}^{[\lambda]}$ 由下面规则定义:

(1) 表 $Y_{S_0}^{[\lambda]}$ 是在杨图 $[\lambda]$ 各格填以 $N-1$ 和容度 $m_{ij}=j-i$ 之和, 即第 i 行第 j 列格子填以 $N-1+j-i$.

(2) 设 $[\lambda^{(1)}]=[\lambda]$. 由 $[\lambda^{(1)}]$ 开始, 相继定义一系列 $[\lambda^{(a)}]$, 其中 $[\lambda^{(a)}]$ 是由 $[\lambda^{(a-1)}]$ 移去第一行和第一列得到. 这过程直进行到 $[\lambda^{(a-1)}]$ 的行数少于 2 为止.

(3) 如果 $[\lambda^{(a)}]$ 行数大于 1, 按下法定义表 $Y_{S_a}^{[\lambda]}$. 在杨图 $[\lambda]$ 前 $a-1$ 行和前 $a-1$ 列都填以零, 余下部分构成杨图 $[\lambda^{(a)}]$. 设杨图 $[\lambda^{(a)}]$ 含 r 行, 在杨图 $[\lambda^{(a)}]$ 中的构形路径 $(1,\ 1)$ 前 $r-1$ 格, 逐格填以 $\lambda_2^{(a)}$, $\lambda_3^{(a)}$, $\cdots$, $\lambda_r^{(a)}$, 在杨图 $[\lambda^{(a)}]$ 每个逆构形路径 $\overline{(i,\ 1)}$, $2\leqslant i\leqslant r$, 前 $\lambda_i^{(a)}$ 格填以 -1. 如果几个 -1 填在同一格, 则填数相加. 其余格子都填零. 在杨图 $[\lambda^{(a)}]$ 中填数之和为零.

下面举些例子来说明维数公式 (9.115) 的用法.

例 1　SO(8) 群的表示 $[+s(3,3,3)]$ 的维数

$$Y_C^{[3,3,3]}=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 7&8&9\\\hline 6&7&8\\\hline 5&6&7\\\hline\end{array}+\begin{array}{|c|c|c|}\hline &3&3\\\hline -1&-1&\\\hline -2&-1&-1\\\hline\end{array}+\begin{array}{|c|c|c|}\hline &&\\\hline &&2\\\hline &-1&-1\\\hline\end{array}=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 7&11&12\\\hline 5&6&10\\\hline 3&4&5\\\hline\end{array}$$

$$\begin{aligned}d_{[+s(3,3,3)]}(\mathrm{SO}(8))&=\left\{d_{[+s]}[\mathrm{SO}(8)]\begin{array}{|c|c|c|}\hline 7&11&12\\\hline 5&6&10\\\hline 3&4&5\\\hline\end{array}\right\}\div\left\{\begin{array}{|c|c|c|}\hline 5&4&3\\\hline 4&3&2\\\hline 3&2&1\\\hline\end{array}\right\}\\&=2^3\times 11\times 7\times 5^2=15400\end{aligned}$$

例 2　SO(N) 群一行杨图 $[s(n)]$ 对应旋量表示的维数

$$\begin{aligned}d_{[s(n)]}(\mathrm{SO}(N))&=d_{[s]}(\mathrm{SO}(N))\,\frac{\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline N-1&N&\cdots&N+n-2\\\hline\end{array}}{\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline n&n-1&\cdots&1\\\hline\end{array}}\\&=d_{[s]}(\mathrm{SO}(N))\begin{pmatrix}N+n-2\\n\end{pmatrix}\end{aligned}\tag{9.116}$$

例 3　SO(N) 群一列杨图 $[s(1^n)]$ 对应旋量表示的维数

$$Y_S^{[1^n]}=\begin{array}{|c|}\hline N-1\\\hline N-2\\\hline \vdots\\\hline N-n+1\\\hline N-n\\\hline\end{array}+\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 1\\\hline \vdots\\\hline 1\\\hline -n+1\\\hline\end{array}=\begin{array}{|c|}\hline N\\\hline N-1\\\hline \vdots\\\hline N-n+2\\\hline N-2n+1\\\hline\end{array}$$

$$d_{[s(1^n)]}(\mathrm{SO}(N))=d_{[s]}(\mathrm{SO}(N))\,\frac{N!(N-2n+1)}{n!(N-n+1)}\tag{9.117}$$

在例 2 和例 3 中, 当 N 为偶数时, s 理解为 $\pm s$.

9.6 SO(4) 群和洛伦兹群

洛伦兹群是物理学中一个十分重要的对称变换群, 它是一个非紧致李群. SO(4) 群是紧致李群, 而且与洛伦兹群很“接近”, 它们只是在参数的实数性条件上有所不同. 本节介绍的, 通过 SO(4) 群的不等价不可约表示, 计算洛伦兹群的不等价不可约表示的方法, 对研究非紧致李群的不等价不可约表示有普遍意义, 因而这方法在数学中也很重要.

一、SO(4) 群不可约表示及其生成元

从邓金图可以看到, 作为李代数有 $D_2 \approx A_1 \oplus A_1$, 它反映了 SO(4) 群与两个 SU(2) 群直乘有同态关系. 本小节先适当组合 SO(4) 群自身表示生成元, 得出 SO(4) 群与两个 SU(2) 群直乘生成元的联系, 并进一步把 SO(4) 群的群元素明显表为两个 SU(2) 群元素的直乘, 具体确定它们间的一比二同态关系. 根据这对应关系, 可以选用相应的参数, 利用 SU(2) 群的不可约表示解析形式, 找出 SO(4) 群的不等价不可约表示解析形式.

式 (7.93) 给出了 SO(4) 群自身表示的六个生成元 T_{ab}. 作适当组合, 例如

$$T_1^{(\pm)} = \frac{1}{2}\left(T_{23} \pm T_{14}\right) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \mp\mathrm{i} \\ 0 & 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ 0 & \mathrm{i} & 0 & 0 \\ \pm\mathrm{i} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{9.118}$$

及其 1, 2, 3 循环. 上式可表成二维矩阵的直乘形式

$$\begin{aligned} T_1^{(+)} &= \frac{1}{2}\sigma_2 \times \sigma_1, \quad & T_2^{(+)} &= \frac{-1}{2}\sigma_2 \times \sigma_3, \quad & T_3^{(+)} &= \frac{1}{2}\mathbf{1}_2 \times \sigma_2 \ , \\ T_1^{(-)} &= \frac{-1}{2}\sigma_1 \times \sigma_2, \quad & T_2^{(-)} &= \frac{-1}{2}\sigma_2 \times \mathbf{1}_2, \quad & T_3^{(-)} &= \frac{1}{2}\sigma_3 \times \sigma_2 \end{aligned}$$

它们分成两组生成元, 分别满足 SU(2) 群生成元的对易关系

$$\left[T_a^{(\pm)},\ T_b^{(\pm)}\right] = \mathrm{i}\sum_{c=1}^{3} \epsilon_{abc} T_c^{(\pm)}, \qquad \left[T_a^{(+)},\ T_b^{(-)}\right] = 0 \tag{9.119}$$

作相似变换 N 后, 这分解可看得更清楚

$$N^{-1}T_a^{(+)}N = (\sigma_a/2) \times \mathbf{1}_2, \quad N^{-1}T_a^{(-)}N = \mathbf{1}_2 \times (\sigma_a/2) \ ,$$

$$N = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 1 \\ -\mathrm{i} & 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & \mathrm{i} & -\mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \tag{9.120}$$

请注意式 (9.22) 是式 (9.120) 的推广. 由此, SO(4) 群任意元素 R 可表为

$$\begin{aligned}
R &= \exp\left(-\mathrm{i}\sum_{a<b}^{4}\omega_{ab}T_{ab}\right) \\
&= \exp\left\{-\mathrm{i}\sum_{a=1}^{3}\left(\omega_a^{(+)}T_a^{(+)}+\omega_a^{(-)}T_a^{(-)}\right)\right\} \\
&= \exp\left\{-\mathrm{i}\omega^{(+)}\hat{\boldsymbol{n}}^{(+)}\cdot\vec{T}^{(+)}\right\}\exp\left\{-\mathrm{i}\omega^{(-)}\hat{\boldsymbol{n}}^{(-)}\cdot\vec{T}^{(-)}\right\} \\
&= N\left\{u(\hat{\boldsymbol{n}}^{(+)},\omega^{(+)})\times u(\hat{\boldsymbol{n}}^{(-)},\omega^{(-)})\right\}N^{-1}
\end{aligned} \tag{9.121}$$

其中

$$\begin{aligned}
&\omega_1^{(\pm)}=\omega_{23}\pm\omega_{14}=\omega^{(\pm)}n_1^{(\pm)}, \\
&\omega_2^{(\pm)}=\omega_{31}\pm\omega_{24}=\omega^{(\pm)}n_2^{(\pm)}, \qquad \omega^{(\pm)}=\left\{\sum_{a=1}^{3}\left(\omega_a^{(\pm)}\right)^2\right\}^{1/2} \\
&\omega_3^{(\pm)}=\omega_{12}\pm\omega_{34}=\omega^{(\pm)}n_3^{(\pm)},
\end{aligned} \tag{9.122}$$

这样, R 矩阵明显地表达成两个二维幺模幺正矩阵 u 的乘积. 两个 u 矩阵同时改变符号, R 矩阵保持不变. 因此, 式 (9.121) 给出 SO(4) 群元素和两个 SU(2) 群直乘元素的一二对应关系, 而且这种对应关系对群元素乘积保持不变, 故有

$$\mathrm{SO}(4)\sim\mathrm{SU}(2)\otimes\mathrm{SU}(2)' \tag{9.123}$$

可以就选这两个 SU(2) 群的参数作为 SO(4) 群的群参数. 为了在测度不为零的区域内, 使群空间的参数与群元素有一一对应的关系, 在确定 SO(4) 群的群空间时, 可把一个 SU(2)′ 群的群空间缩小一半, 即规定 SO(4) 群群参数的变化区域如下

$$\begin{aligned}
&0\leqslant\omega^{(+)}\leqslant 2\pi, \qquad 0\leqslant\omega^{(-)}\leqslant\pi\ , \\
&0\leqslant\theta^{(\pm)}\leqslant\pi, \qquad -\pi\leqslant\varphi^{(\pm)}\leqslant\pi
\end{aligned} \tag{9.124}$$

其中, $\theta^{(\pm)}$ 和 $\varphi^{(\pm)}$ 是 $\hat{\boldsymbol{n}}^{(\pm)}$ 方向的极角和方位角. 由于一个 SU(2)′ 群的群空间缩小了一半, 就类似于 SO(3) 群的群空间, 在群空间的边界上直径两端的点对应同一个群元素, 这决定了 SO(4) 群的群空间是双连通的. 双连通性反映了 R 矩阵在两个 u 矩阵同时改号时保持不变

$$\begin{aligned}
&R(\hat{\boldsymbol{n}}^{(+)},\omega^{(+)};\hat{\boldsymbol{n}}^{(-)},\omega^{(-)})=R(-\hat{\boldsymbol{n}}^{(+)},(2\pi-\omega^{(+)});-\hat{\boldsymbol{n}}^{(-)},(2\pi-\omega^{(-)}))\ , \\
&R(\hat{\boldsymbol{n}}^{(+)},\omega^{(+)};\hat{\boldsymbol{n}}^{(-)},\pi)=R(-\hat{\boldsymbol{n}}^{(+)},(2\pi-\omega^{(+)});-\hat{\boldsymbol{n}}^{(-)},\pi)
\end{aligned} \tag{9.125}$$

SO(4) 群的覆盖群是 SU(2)⊗SU(2)′ 群. 选择这组参数后, SO(4) 群群上积分的密度函数为

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}R &= \frac{1}{8\pi^4}\sin^2\left(\omega^{(+)}/2\right)\sin^2\left(\omega^{(-)}/2\right)\sin\theta^{(+)}\sin\theta^{(-)} \\
&\quad\times\mathrm{d}\omega^{(+)}\mathrm{d}\omega^{(-)}\mathrm{d}\theta^{(+)}\mathrm{d}\theta^{(-)}\mathrm{d}\varphi^{(+)}\mathrm{d}\varphi^{(-)}
\end{aligned} \tag{9.126}$$

SO(4) 群的不等价不可约表示都可表成两个 SU(2) 群不等价不可约表示的直乘, 记作 D^{jk}

$$\begin{aligned} &D^{jk}(\mathrm{SO}(4)) = D^j(\mathrm{SU}(2)) \times D^k(\mathrm{SU}(2)') , \\ &D^{jk}\left(\hat{\boldsymbol{n}}^{(+)}, \omega^{(+)}; \hat{\boldsymbol{n}}^{(-)}, \omega^{(-)}\right) = D^j\left(\hat{\boldsymbol{n}}^{(+)}, \omega^{(+)}\right) \times D^k\left(\hat{\boldsymbol{n}}^{(-)}, \omega^{(-)}\right) \end{aligned} \tag{9.127}$$

D^{jk} 是 $(2j+1)(2k+1)$ 维的, 它的行 (列) 指标用两个字母 $(\mu\nu)$ 共同标记, 它的生成元 I^{jk} 可由 SU(2) 群相应表示生成元 I^j 表出

$$\begin{aligned} &I_a^{jk(+)} = I_a^j \times \mathbf{1}_{2k+1}, \qquad I_a^{jk(-)} = \mathbf{1}_{2j+1} \times I_a^k , \\ &I_{ab}^{jk} = \sum_{c=1}^{3} \epsilon_{abc}\left(I_c^{jk(+)} + I_c^{jk(-)}\right) = \sum_{c=1}^{3} \epsilon_{abc}\left(I_c^j \times \mathbf{1}_{2k+1} + \mathbf{1}_{2j+1} \times I_c^k\right) , \\ &I_{a4}^{jk} = I_a^{jk(+)} - I_a^{jk(-)} = I_a^j \times \mathbf{1}_{2k+1} - \mathbf{1}_{2j+1} \times I_a^k \end{aligned} \tag{9.128}$$

D^{jk} 表示的直乘分解, 可以借用 SU(2) 群表示的性质来计算. 例如

$$\begin{aligned} &\left(C^{j_1 j_2}\right)^{-1}\left(D^{j_1 0}(R) \times D^{j_2 0}(R)\right)\left(C^{j_1 j_2}\right) = \bigoplus_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} D^{J0}(R) , \\ &\left(C^{k_1 k_2}\right)^{-1}\left(D^{0 k_1}(R) \times D^{0 k_2}(R)\right)\left(C^{k_1 k_2}\right) = \bigoplus_{K=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} D^{0K}(R) , \\ &D^{j_1 k_1}(R) \times D^{j_2 k_2}(R) \simeq \bigoplus_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \bigoplus_{K=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} D^{JK}(R) \end{aligned} \tag{9.129}$$

事实上, $I_a^{jk(\pm)}$ 与谢瓦莱基有直接的联系

$$\begin{aligned} &H_1 = 2I_3^{jk(-)}, \qquad H_2 = 2I_3^{jk(+)}, \\ &E_1 = I_1^{jk(-)} + \mathrm{i}I_2^{jk(-)}, \qquad E_2 = I_1^{jk(+)} + \mathrm{i}I_2^{jk(+)} \end{aligned} \tag{9.130}$$

因而 D^{jk} 表示对应的最高权为 $\boldsymbol{M} = (2k, 2j)$, 相应的杨图标记为

$$\begin{array}{ll} \text{当 } j = k, & D^{jj} \simeq [2j, 0] \\ \text{当 } j-k \text{ 是正整数}, & D^{jk} \simeq [(S)(j+k), (j-k)] \ \text{是自对偶表示} \\ \text{当 } k-j \text{ 是正整数}, & D^{jk} \simeq [(A)(j+k), (k-j)] \ \text{是反自对偶表示} \\ \text{当 } j-k-1/2 \text{ 是正整数}, & D^{jk} \simeq [+s(j+k-1/2,\ j-k-1/2)] \\ \text{当 } k-j-1/2 \text{ 是正整数}, & D^{jk} \simeq [-s(j+k-1/2,\ k-j-1/2)] \end{array} \tag{9.131}$$

采用式 (9.66) 的 γ_a 矩阵形式, 可以计算 SO(4) 群的基本旋量表示生成元

$$\begin{aligned} &S_{23} = (\sigma_2 \times \sigma_2)/2, \qquad S_{14} = -(\sigma_1 \times \sigma_1)/2 \\ &S_{31} = -(\sigma_1 \times \sigma_2)/2, \qquad S_{24} = -(\sigma_2 \times \sigma_1)/2 \\ &S_{12} = (\sigma_3 \times \mathbf{1})/2, \qquad S_{34} = (\mathbf{1} \times \sigma_3)/2 \end{aligned} \tag{9.132}$$

经过类似式 (9.118) 的组合后, 它们化成两组互相对易的生成元, 分别满足 SU(2) 群生成元的对易关系. 再经过相似变换 X

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

可把 $S_a^{\pm}$ 分别化成基本旋量表示 $D^{\frac{1}{2}0}$ 和 $D^{0\frac{1}{2}}$ 的生成元

$$S_a^{\pm} = P_{\pm} \times \sigma_a/2, \qquad P_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad P_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{9.133}$$

即基本旋量表示是 $D^{\frac{1}{2}0} \oplus D^{0\frac{1}{2}}$. SO(4) 群的恒等表示是 D^{00}, 自身表示等价于 $D^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$.

二、O(4) 群不可约单值表示

现在讨论 O(4) 群的不可约单值表示. 正如 9.2 节所讨论的那样, 关键要在 SO(4) 群的陪集里找一个代表元素, 确定它的表示矩阵. 全反演变换 $\rho = -\mathbf{1}$ 不能作为陪集的代表元素, 因为它的行列式是 1. 通常选 τ 作为陪集的代表元素, 它是对角矩阵, 仅第四个对角元为 -1, 其余为 1. 生成元在 τ 变换下的变换规则是由群元素乘积规则计算出来的, 因而对所有表示都一样. 可在自身表示中计算这规则

$$\begin{aligned} &\tau T_{ab} \tau^{-1} = T_{ab}, \qquad &&\tau T_{a4} \tau^{-1} = -T_{a4}\ , \\ &\tau T_a^{(\pm)} \tau^{-1} = T_a^{(\mp)}, \qquad &&\tau\ \left(T^{(\pm)}\right)^2\ \tau^{-1} = \left(T^{(\mp)}\right)^2 \end{aligned} \tag{9.134}$$

其中

$$\left(T^{(\pm)}\right)^2 = \sum_{a=1}^{3}\ \left(T_a^{(\pm)}\right)^2 \tag{9.135}$$

把 O(4) 变换的标量函数变换算符记作 P_R, 它的生成元记作 L_{ab} 或其组合 $L_a^{\pm}$, 类似式 (9.135) 可得 $\left(L^{(\pm)}\right)^2$. 设 $\Psi_{\mu\nu}^{jk}$ 在 SO(4) 变换中按 D^{jk} 表示变换

$$\begin{aligned} P_R \Psi_{\mu\nu}^{jk} &= \sum_{\mu'\nu'} \ \Psi_{\mu'\nu'}^{jk} D_{\mu'\nu',\mu\nu}^{jk}(R) \\ &= \sum_{\mu'\nu'} \ \Psi_{\mu'\nu'}^{jk} D_{\mu'\mu}^{j}(\hat{\boldsymbol{n}}^{(+)}, \omega^{(+)}) D_{\nu'\nu}^{k}(\hat{\boldsymbol{n}}^{(-)}, \omega^{(-)}) \end{aligned} \tag{9.136}$$

其中, $j+k$ 是整数, 则 $\Psi_{\mu\nu}^{jk}$ 是 $L_3^{(\pm)}$ 和 $\left(L^{(\pm)}\right)^2$ 的共同本征函数

$$\begin{aligned} &L_3^{(+)} \Psi_{\mu\nu}^{jk} = \mu \Psi_{\mu\nu}^{jk}, \qquad &&L_3^{(-)} \Psi_{\mu\nu}^{jk} = \nu \Psi_{\mu\nu}^{jk}\ , \\ &\left(L^{(+)}\right)^2 \Psi_{\mu\nu}^{jk} = j(j+1) \Psi_{\mu\nu}^{jk}, \qquad &&\left(L^{(-)}\right)^2 \Psi_{\mu\nu}^{jk} = k(k+1) \Psi_{\mu\nu}^{jk} \end{aligned} \tag{9.137}$$

经 τ 变换, $P_\tau \Psi^{jk}_{\mu\nu}$ 仍是上述四算符的共同本征函数, 只是本征值 μ 和 ν 交换, $j(j+1)$ 和 $k(k+1)$ 交换, 因而有

$$\begin{aligned}
&P_\tau \Psi^{jk}_{\mu\nu} = \mathbf{\Phi}^{kj}_{\nu\mu}, && P_\tau \mathbf{\Phi}^{kj}_{\nu\mu} = \Psi^{jk}_{\mu\nu}, \\
&L_3^{(+)}\mathbf{\Phi}^{kj}_{\nu\mu} = \nu\mathbf{\Phi}^{kj}_{\nu\mu}, && L_3^{(-)}\mathbf{\Phi}^{kj}_{\nu\mu} = \mu\mathbf{\Phi}^{kj}_{\nu\mu}\ , \\
&\left(L^{(+)}\right)^2 \mathbf{\Phi}^{kj}_{\nu\mu} = k(k+1)\mathbf{\Phi}^{kj}_{\nu\mu}, && \left(L^{(-)}\right)^2 \mathbf{\Phi}^{kj}_{\nu\mu} = j(j+1)\mathbf{\Phi}^{kj}_{\nu\mu}
\end{aligned}$$

其中用到 $P_\tau^2 = P_E = \mathbf{1}$. $\mathbf{\Phi}^{kj}_{\nu\mu}$ 在 SO(4) 变换中按表示 D^{kj} 变换. 可见当 $j \neq k$ 时, SO(4) 群的两个分属表示 D^{jk} 和 D^{kj} 的表示空间对 O(4) 群不再是不变的, 它们直和起来才对 O(4) 群保持不变, 从而由 SO(4) 群两个不可约表示 D^{jk} 和 D^{kj}, 诱导出 O(4) 群一个不可约表示 Δ^{jk}. 幺正表示 Δ^{jk} 的行 (列) 指标, 除了用 $\mu\nu$ 标记外, 还需要引入指标 $\alpha = \pm$ 以区分两个不同的表示空间

$$\begin{aligned}
&\Delta^{jk}_{\mu\nu+,\mu'\nu'+}(R) = D^{jk}_{\mu\nu,\mu'\nu'}(R), && \Delta^{jk}_{\nu\mu-,\nu'\mu'-}(R) = D^{kj}_{\nu\mu,\nu'\mu'}(R), \\
&\Delta^{jk}_{\mu\nu+,\nu'\mu'-}(R) = \Delta^{jk}_{\nu\mu-,\mu'\nu'+}(R) = 0, && \Delta^{jk}_{\mu\nu\alpha,\nu'\mu'\beta}(\tau) = \delta_{(-\alpha)\beta}\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'}
\end{aligned} \tag{9.138}$$

其中, $R \in$SO(4). $\Delta^{jk}(\tau)$ 改变一个负号, 对应等价表示. 当 $j = k$ 时, 情况比较特殊, 有

$$\psi^{jj\pm}_{\mu\nu} \sim \Psi^{jj}_{\mu\nu} \pm \mathbf{\Phi}^{jj}_{\mu\nu}, \qquad P_\tau \psi^{jj\pm}_{\mu\nu} = \pm\psi^{jj\pm}_{\nu\mu}$$

可见 $\psi^{jj\pm}_{\mu\nu}$ 分别构成的空间都对 O(4) 群保持不变, 即由 SO(4) 群一个不可约幺正表示 D^{jj} 诱导出 O(4) 群两个不等价的不可约幺正表示 $\Delta^{jj\pm}$

$$\Delta^{jj\pm}(R) = D^{jj}(R), \qquad \Delta^{jj\pm}_{\mu\nu,\nu'\mu'}(\tau) = \pm\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'} \tag{9.139}$$

其中, $R \in$ SO(4).

三、洛伦兹群的性质

四维时空两个惯性系间的坐标变换称为洛伦兹变换. 对洛伦兹变换, 物理中通常取坐标系变换的观点, 但为了本书前后统一起见, 我们仍采用系统变换的观点, 两者互差逆变换. 物理中对四维时空有两种常用的坐标及其度规. 一种是取虚坐标 $x_4 = \mathrm{i}ct$ 和欧几里得度规 (单位矩阵), 其中 t 是时间, c 是光速, 而洛伦兹变换矩阵 A 是四维正交矩阵

$$A^{\mathrm{T}}A = AA^{\mathrm{T}} = \mathbf{1} \tag{9.140}$$

A 矩阵元素满足如下实数性条件

$$A_{ab}\ 和\ A_{44}\ 是实数,\quad A_{a4}\ 和\ A_{4a}\ 是虚数\ ,\qquad a\ 和\ b = 1,\ 2,\ 3 \tag{9.141}$$

这实数性条件在 A 矩阵乘积中保持不变. 所有这样的正交矩阵 A 的集合, 按矩阵乘积规则, 满足群的四个条件, 构成群, 称为齐次洛伦兹群, 记作 L_h. 另一种是取实

坐标和闵可夫斯基度规 η, $x_0 = ct$, 行 (列) 指标按 0, 1, 2, 3 排列, 洛伦兹变换矩阵 $\mathcal{A}$ 是实的赝正交矩阵

$$\mathcal{A}^{\mathrm{T}}\eta\mathcal{A} = \eta, \qquad \eta = \mathrm{diag}\{1, -1, -1, -1\} \tag{9.142}$$

所有这样的赝正交矩阵 $\mathcal{A}$ 的集合, 按矩阵乘积规则, 满足群的四个条件, 构成群 O(3,1), 它当然与 L_h 群同构, 因为两类洛伦兹变换矩阵可通过相似变换 M 相联系

$$M^{-1}\mathcal{A}M = A, \quad M = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad M^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{9.143}$$

一个典型的例子是沿第三轴方向相对速度为 v 的洛伦兹变换

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cosh\omega & -\mathrm{i}\sinh\omega \\ 0 & 0 & \mathrm{i}\sinh\omega & \cosh\omega \end{pmatrix}, \quad \mathcal{A} = \begin{pmatrix} \cosh\omega & 0 & 0 & \sinh\omega \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \sinh\omega & 0 & 0 & \cosh\omega \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} &M^{-1}\mathcal{A}M = A, && v = c\tanh\omega \\ &\cosh\omega = \left(1 - v^2/c^2\right)^{-1/2}, && \sinh\omega = (v/c)\left(1 - v^2/c^2\right)^{-1/2} \end{aligned} \tag{9.144}$$

本节采取虚坐标 $x_4 = \mathrm{i}ct$ 和欧几里得度规.

由正交条件 (9.140) 得两个不连续条件

$$\det A = \pm 1, \qquad A_{44}^2 = 1 + \sum_{a=1}^{3} |A_{a4}|^2 \geqslant 1 \tag{9.145}$$

它们把 L_h 群的群空间分成不相连接的四片, 包含恒元的那片满足

$$\det A = 1, \qquad A_{44} \geqslant 1 \tag{9.146}$$

满足此条件的元素集合构成简单李群, 称为固有 (proper) 洛伦兹群, 记作 L_p. 由于 A_{44} 的绝对值没有上限, L_p 群的群空间是欧氏空间的一个开区域, L_p 群是非紧致李群. 在 L_p 群的三个陪集中各选一个对角矩阵作为代表元素, 即空间反演变换 σ, 时间反演变换 τ 和全反演变换 ρ

$$\begin{aligned} \sigma &= \mathrm{diag}\,(-1,\ -1,\ -1,\ 1)\ , \\ \tau &= \mathrm{diag}\,(1,\ 1,\ 1,\ -1)\ , \\ \rho &= \mathrm{diag}\,(-1,\ -1,\ -1,\ -1) \end{aligned} \tag{9.147}$$

这三个元素, 加上恒元, 构成四阶反演群 V_4. 齐次洛伦兹群的四个连续片分别用表 9.4 中给出的符号标记, 其中箭头代表时间轴取向, 即 A_{44} 的符号, 下标描写行列式的符号. L_p 和 $L_-^\uparrow$ 合在一起, 构成正时洛伦兹群, 也称完全 (full) 洛伦兹群, 记作 L_f.

表 9.4 固有洛伦兹群及其陪集

名 称	$\det A$	A_{44}	代表元素
$L_+^\uparrow = L_p$	1	$\geqslant 1$	E
$L_-^\uparrow$	-1	$\geqslant 1$	σ
$L_-^\downarrow$	-1	$\leqslant -1$	τ
$L_+^\downarrow$	1	$\leqslant -1$	ρ

四、固有洛伦兹群的不可约表示

讨论 L_p 群自身表示的生成元. 设 A 是无穷小元素

$$\begin{aligned}
&A = \mathbf{1} - \mathrm{i}\alpha X, && A^{\mathrm{T}} = \mathbf{1} - \mathrm{i}\alpha X^{\mathrm{T}} , \\
&\mathbf{1} = A^{\mathrm{T}} A = \mathbf{1} - \mathrm{i}\alpha \left(X + X^{\mathrm{T}}\right), && X^{\mathrm{T}} = -X , \\
&1 = \det A = 1 - \mathrm{i}\alpha \mathrm{Tr} X, && \mathrm{Tr} X = 0
\end{aligned}$$

因此 X 是无迹反对称矩阵, 可以按照 SO(4) 群自身表示生成元展开

$$\begin{aligned}
A &= \mathbf{1} - \mathrm{i}\sum_{a<b}^{3} \omega_{ab} T_{ab} - \mathrm{i}\sum_{a=1}^{3} \omega_{a4} T_{a4} \\
&= \mathbf{1} - \mathrm{i}\sum_{a=1}^{3} \left(\omega_a^{(+)} T_a^{(+)} + \omega_a^{(-)} T_a^{(-)}\right)
\end{aligned} \tag{9.148}$$

由于实数性条件式 (9.141)

$$\begin{aligned}
&\omega_1^{(\pm)} = \omega_{23} \pm \omega_{14}, \quad && \omega_2^{(\pm)} = \omega_{31} \pm \omega_{24}, \quad && \omega_3^{(\pm)} = \omega_{12} \pm \omega_{34} , \\
&\omega_{ab} \ \text{是实数}, && \omega_{a4} \ \text{是虚数}, && \omega_a^{(+)} = \left(\omega_a^{(-)}\right)^*
\end{aligned} \tag{9.149}$$

如果允许采用虚参数, 则除了参数的实数性条件不一样外, SO(4) 群和 L_p 群自身表示生成元相同, 结构常数相同, 两群在对应不可约表示中的生成元也相同. 这就是说, 两群的不等价不可约表示是一一对应的. L_p 群的有限维不等价不可约表示都可表为 $D^{jk}(L_p)$, 生成元为

$$\begin{aligned}
&I_{ab}^{jk} = \sum_{c=1}^{3} \epsilon_{abc} \left\{I_c^{jk(+)} + I_c^{jk(-)}\right\}, \qquad && I_{a4}^{jk} = I_a^{jk(+)} - I_a^{jk(-)} , \\
&I_a^{jk(+)} = I_a^j \times \mathbf{1}_{2k+1}, && I_a^{jk(-)} = \mathbf{1}_{2j+1} \times I_a^k
\end{aligned} \tag{9.150}$$

其中, a, b 和 c 都取 1~3, I_a^j 和 I_a^k 是 SU(2) 群相应表示的生成元. 由此, 表示的维数, 表示的单值性和表示直乘的约化公式, 对 SO(4) 群和 L_p 群都一样. 但因参数实数性条件不同, 两群的整体性质很不一样, L_p 群有限维不可约表示 D^{jk}, 除了恒等表示外, 都不是幺正表示. L_p 群可以有无限维幺正表示, 本书不做讨论.

洛伦兹群是物理学中常用的对称变换群, 在实际计算中经常还需要写出群元素表示矩阵的解析形式. 这时, 上面选用的参数 ω 就不很方便. 需要选用类似欧拉角的参数, 把任意固有洛伦兹变换表成六个变换的乘积, 其中尽可能多地用转动变换, 但至少有一个是惯性系的变换. 这六个参数的确定方法如下.

与 T_{ab} 相联系的变换显然是转动变换, 属于子群 SO(3). 现在的变换矩阵要写成四维矩阵, 例如绕 z 轴的转动表为

$$R(\vec{e}_3,\varphi)=\begin{pmatrix}\cos\varphi & -\sin\varphi & 0 & 0\\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix} \tag{9.151}$$

与 T_{a4} 相联系的变换, 参数是虚数 ω_{a4}. 参数 $\omega_{34}=\mathrm{i}\omega$ 时元素的变换矩阵 $A(\vec{e}_3,\mathrm{i}\omega)\equiv\exp\{-\mathrm{i}(\mathrm{i}\omega)T_{34}\}$ 正是式 (9.144) 给出的矩阵 A. 矩阵指数函数展开的方法见第四章式 (4.10). 这变换矩阵与物理教科书中给出的洛伦兹变换矩阵差逆变换, 原因是我们采用系统变换的观点, 物理教科书中常采用坐标系变换的观点.

对于任意给定的固有洛伦兹变换 A, $\det A=1$, $A_{44}\geqslant 1$. 令 $A_{44}=\cosh\omega$, 定出 ω 值. 从 A_{a4} 中提出因子 $-\mathrm{i}\sinh\omega$, 余下的部分看作三维空间单位矢量 $\hat{\boldsymbol{n}}(\theta,\varphi)$

$$\begin{aligned}&A_{44}=\cosh\omega, &&\mathrm{i}A_{14}/\sinh\omega=\sin\theta\cos\varphi\ ,\\ &\mathrm{i}A_{24}/\sinh\omega=\sin\theta\sin\varphi, &&\mathrm{i}A_{34}/\sinh\omega=\cos\theta\end{aligned} \tag{9.152}$$

由此定出 θ 和 φ 值. 令

$$A(\varphi,\theta,\omega,0,0,0)=R(\vec{e}_3,\varphi)R(\vec{e}_2,\theta)A(\vec{e}_3,\mathrm{i}\omega) \tag{9.153}$$

有

$$A(\varphi,\theta,\omega,0,0,0)\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}A_{14}\\A_{24}\\A_{34}\\A_{44}\end{pmatrix}$$

则 $A(\varphi,\theta,\omega,0,0,0)^{-1}A$ 是个纯粹的转动 $R(\alpha,\beta,\gamma)$, 由此可确定三个参数 α,β,γ. 把这六个参数标在元素 A 上, 得

$$A=A(\varphi,\theta,\omega,\alpha,\beta,\gamma)=R(\varphi,\theta,0)A(\vec{e}_3,\mathrm{i}\omega)R(\alpha,\beta,\gamma) \tag{9.154}$$

这六个参数的取值范围是

$$\begin{aligned}
&0 \leqslant \omega < \infty, \qquad &0 \leqslant \theta \leqslant \pi, \qquad &0 \leqslant \beta \leqslant \pi, \\
&-\pi \leqslant \varphi \leqslant \pi, \qquad &-\pi \leqslant \alpha \leqslant \pi, \qquad &-\pi \leqslant \gamma \leqslant \pi
\end{aligned} \tag{9.155}$$

这分解的几何意义是十分清楚的. 设 K 是惯性参照系, K' 是固定在系统上的坐标系, A 把 K' 系由与 K 系重合的位置变换到现在位置, 则 A 是 K' 系相对 K 系的洛伦兹变换. 设 K' 系相对 K 系沿 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向以速度 $\boldsymbol{v}$ 运动. A 的分解式 (9.154) 表明, $R(\varphi,\theta,0)$ 把 K 系的 x_3 轴转到 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向, $R(0,\beta,\gamma)^{-1}$ 把 K' 系的 x_3' 轴转到 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向, 这样两个新的惯性系的第三轴互相平行, 都沿 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向, $R(\vec{e}_3,\alpha)$ 使上述两系的第一轴和第二轴也分别互相平行, 最后, 洛伦兹变换 $A(\vec{e}_3,\mathrm{i}\omega)$ 把这两个惯性系联系起来.

根据式 (9.149) 和 (9.150) 可以具体写出洛伦兹变换 $A(\varphi,\theta,\omega,\alpha,\beta,\gamma)$ 在表示 $D^{jk}(\mathrm{L}_p)$ 中的表示矩阵. 对转动变换 $R(\alpha,\beta,\gamma)$ 和沿 x_3 方向的洛伦兹变换 $A(\vec{e}_3,\mathrm{i}\omega)$ 有

$$\begin{aligned}
&D^{jk}(\alpha,\beta,\gamma) = D^j(\alpha,\beta,\gamma) \times D^k(\alpha,\beta,\gamma), \\
&D^{jk}(\vec{e}_3,\mathrm{i}\omega) = \exp(\omega I_3^j) \times \exp(-\omega I_3^k)
\end{aligned} \tag{9.156}$$

其中, I_3^j 和 I_3^k 是对角矩阵. 合起来, 写成矩阵元素形式为

$$\begin{aligned}
D^{jk}_{\mu\nu,\mu'\nu'}(\varphi,\theta,\omega,\alpha,\beta,\gamma) \; = & \sum_{\rho\tau} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mu+\nu)\varphi} d^j_{\mu\rho}(\theta) d^k_{\nu\tau}(\theta) \mathrm{e}^{(\rho-\tau)\omega} \\
& \times \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\rho+\tau)\alpha} d^j_{\rho\mu'}(\beta) d^k_{\tau\nu'}(\beta) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mu'+\nu')\gamma}
\end{aligned} \tag{9.157}$$

五、固有洛伦兹群的覆盖群

在讨论 SO(4) 群的覆盖群时, 先通过相似变换把群元素对角化, 然后把它变成对角矩阵的指数函数, 再在指数上做逆相似变换, 从而把群元素表成矩阵的指数函数形式, 指数属 SO(4) 群的实李代数. 根据生成元可分解成互相对易的两组, 证明了 SO(4) 群与 SU(2)⊗SU(2)′ 群同态. 虽然 L_p 群的元素不一定可以通过相似变换对角化, 但可以利用 L_p 群和 SO(4) 群对应表示生成元相同的性质, 找出 L_p 群的覆盖群, 并把群元素表为矩阵的指数函数形式, 且指数属 L_p 群的实李代数. 数学上说, 如果李群的每一元素都属于一个单参数子李群, 则称该李群存在指数映照. 按照李氏第一定理, 在这李群的线性表示里, 群元素的表示矩阵都可表为矩阵的指数函数形式, 且指数乘 i 后是生成元的实线性组合. 反过来说, 对矩阵李群, 如果它的每一群元素都可表为矩阵的指数函数形式, 且指数属对应实李代数, 则此李群存在指数映照. 数学上证明, 紧致李群都存在指数映照, 但非紧致李群不一定存在指数映照. 附录 39 中给出若干非紧致李群不存在指数映照的例子. L_p 群是非紧致李群, 但存在指数映照.

SO(4) 群的自身表示可以通过相似变换 N 化为表示 $D^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$[见式 (9.120)]. 这关系同样适合于 L_p 群. 根据式 (9.154) 和 (9.156), 有

$$\begin{aligned}
A &= A(\varphi,\theta,\omega,\alpha,\beta,\gamma) \\
&= N\left\{u(\varphi,\theta,0)\times u(\varphi,\theta,0)\right\}\left\{\exp\left(\omega\sigma_3/2\right)\times\exp\left(-\omega\sigma_3/2\right)\right\} \\
&\quad\times \left\{u(\alpha,\beta,\gamma)\times u(\alpha,\beta,\gamma)\right\}N^{-1} \\
&= N\left\{M\times(\sigma_2 M^*\sigma_2)\right\}N^{-1}\ , \\
M &= u(\varphi,\theta,0)\exp\left(\omega\sigma_3/2\right)u(\alpha,\beta,\gamma)\in \mathrm{SL}(2,C)
\end{aligned} \tag{9.158}$$

其中, $D^{1/2}(\alpha,\beta,\gamma)=u(\alpha,\beta,\gamma)$ 就是 SU(2) 群元素. 显然, M 的行列式为 1, 它属于二维幺模复矩阵群 $\mathrm{SL}(2,C)$. 式 (9.158) 给出 L_p 群元素 A 和 $\mathrm{SL}(2,C)$ 群元素 M 间的一个对应关系. 设有 $\mathrm{SL}(2,C)$ 群的两个不同元素 M 和 M', 通过式 (9.158) 对应 L_p 群同一个元素 A, 则

$$\mathbf{1}=N^{-1}\left(AA^{-1}\right)N=MM^{'-1}\times\sigma_2\left(MM^{'-1}\right)^*\sigma_2$$

即 $MM^{'-1}$ 必须是常数矩阵 $c\mathbf{1}$, 取行列式得 $c^2=1$. 因为 L_p 群和 $\mathrm{SL}(2,C)$ 群的阶数都是 6, 所以这种对应关系不会在 L_p 群和 $\mathrm{SL}(2,C)$ 群的一个子李群间实现. 式 (9.158) 给出 L_p 群元素 A 和 $\mathrm{SL}(2,C)$ 群元素 $\pm M$ 间的一个 1∶2 对应关系, 这对应关系显然对群元素乘积保持不变, 因而 L_p 群和 $\mathrm{SL}(2,C)$ 群同态, $\mathrm{SL}(2,C)$ 群是 L_p 群的覆盖群, 它们都是单纯李群.

现在利用这种同态关系, 把 L_p 群元素表为矩阵的指数函数形式. 若 M 的两个本征值不相等, 则它可通过幺模相似变换 Y 对角化. 由于 M 的行列式为 1, 对角元互为倒数

$$Y^{-1}MY=\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\tau} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\tau}\end{pmatrix}=\exp\left\{-\mathrm{i}\begin{pmatrix}\tau & 0 \\ 0 & -\tau\end{pmatrix}\right\} \tag{9.159}$$

若 M 的两个本征值相等, 都是 1, 则可通过幺模相似变换 Y 化为阶梯矩阵

$$Y^{-1}MY=\begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 0 & 1\end{pmatrix}=\exp\left\{\begin{pmatrix}0 & -2 \\ 0 & 0\end{pmatrix}\right\} \tag{9.160}$$

若 M 的两个本征值都为 -1, 则由于 $\pm M$ 和 A 的二一对应关系, 可取 $-M$ 来讨论. 式 (9.159) 中出现的 τ 一般是复数, 可选 τ 的虚部为正. 式 (9.160) 中的参数 2 也可取其他非零复数, 参数 2 改为零时对应 $M=\pm\mathbf{1}$. 因此略去可能的负号后, M 一般地可表为 $\exp\left(-\mathrm{i}B\right)$ 形式, B 是无迹复矩阵, 可按泡利矩阵展开, 展开系数是复数

$$M=\exp\left(-\mathrm{i}\vec{\Omega}\cdot\vec{\sigma}/2\right) \tag{9.161}$$

代入式 (9.158), L_p 群的任意元素可表为

$$\begin{aligned} A &= N\left\{\exp\left(-\mathrm{i}\vec{\Omega}\cdot\vec{\sigma}/2\right)\times\exp\left(-\mathrm{i}\vec{\Omega}^*\cdot\vec{\sigma}/2\right)\right\}N^{-1} \\ &= \exp\left(-\mathrm{i}\vec{\Omega}\cdot\vec{T}^{(+)}\right)\exp\left(-\mathrm{i}\vec{\Omega}^*\cdot\vec{T}^{(-)}\right) \\ &= \exp\left\{-\mathrm{i}\sum_{a=1}^{3}\left(\Omega_a T_a^{(+)}+\Omega_a^* T_a^{(-)}\right)\right\} \\ &= \exp\left\{-\mathrm{i}\sum_{a<b}\omega_{ab}T_{ab}-\mathrm{i}\sum_{a=1}^{3}\omega_{a4}T_{a4}\right\} \end{aligned} \tag{9.162}$$

其中

$$\omega_{ab}=\frac{1}{2}\sum_{c=1}^{3}\epsilon_{abc}\left(\Omega_c+\Omega_c^*\right),\qquad \omega_{a4}=\frac{1}{2}\left(\Omega_a-\Omega_a^*\right) \tag{9.163}$$

这样, 把任意洛伦兹变换 A 表成矩阵的指数函数形式, 参数 ω_{ab} 是实数, ω_{a4} 是虚数, 因而指数部分属 L_p 群的实李代数. 当参数很小时, 式 (9.163) 回到式 (9.148). 这组参数相当 SO(3) 群中的参数 $\vec{\omega}$, 主要供理论研究用, 实际计算则不太方便. 选用这组参数时, A 在表示 D^{jk} 中的表示矩阵是

$$\begin{aligned} D^{jk}(A) &= \exp\left\{-\mathrm{i}\sum_{a<b}\omega_{ab}I_{ab}^{jk}-\mathrm{i}\sum_{a=1}^{3}\omega_{a4}I_{a4}^{jk}\right\} \\ &= \exp\left\{-\mathrm{i}\sum_{a=1}^{3}\Omega_a I_a^j\right\}\times\exp\left\{-\mathrm{i}\sum_{a=1}^{3}\Omega_a^* I_a^k\right\} \end{aligned} \tag{9.164}$$

本小节提供的方法原则上解决了两组参数之间的换算, 即根据参数 (φ, θ, ω, α, β, γ), 由式 (9.158) 定出 M 矩阵, 再由式 (9.161) 和 (9.163) 计算参数 ω_{ab} 和 ω_{a4}. 反之, 根据参数 ω_{ab} 和 ω_{a4}, 由式 (9.162) 计算 A 矩阵, 从而定出参数 $(\varphi,\theta,\omega,\alpha,\beta,\gamma)$. 当然实际计算是很繁的.

六、固有洛伦兹群的类

在互相共轭的元素中选一个代表元素, 用它的参数描写李群的类. 对矩阵群, 常把群元素对角化, 用对角元素来描写类. L_p 群的群元素是正交矩阵, 当四个本征值都为 1 时, 除了恒元都不能通过相似变换对角化. 但由于 L_p 群和 $SL(2,C)$ 群同态, 可以通过 $SL(2,C)$ 群的类来研究 L_p 群的类.

当 $SL(2,C)$ 群的任意元素 M 的两个本征值不相等时, 由式 (9.159), M 共轭于对角矩阵. 可取 τ 的虚部为正, τ 增加 π 对应 M 改符号. 用 τ 描写 M 矩阵所属的类, 也描写 L_p 群的类. 通过式 (9.161) 和 (9.163) 定出 A 的参数 $\Omega_3=2\tau$ 和

$$\omega_{12}=\varphi=\tau+\tau^*,\qquad \omega_{34}=\mathrm{i}\omega=\tau-\tau^* \tag{9.165}$$

L_p 群的类中元素都共轭于代表元素 $A(\varphi,0,\omega,0,0,0)$

$$A=\begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cosh\omega & -\mathrm{i}\sinh\omega \\ 0 & 0 & \mathrm{i}\sinh\omega & \cosh\omega \end{pmatrix}, \quad \begin{array}{l} -\pi\leqslant\varphi\leqslant\pi \\ 0\leqslant\omega<\infty \end{array} \tag{9.166}$$

当 $SL(2,C)$ 群任意元素 M 的两个本征值相等时，它们或者都为 1，或者都为 -1. 若 M 是对角矩阵，则 $M=\pm\mathbf{1}$，在 $SL(2,C)$ 群构成两类，对应 L_p 群一个类，即恒元构成的类. 若 M 不是对角矩阵，则在 $SL(2,C)$ 群也构成两类，代表元素去掉正负号后为

$$\begin{aligned} &u(-\pi,\pi/4,0)\begin{pmatrix} \sqrt{2}+1 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}-1 \end{pmatrix}u(\pi,3\pi/4,0)=\begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &=\exp\left\{\begin{pmatrix} 0 & -2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\right\}=\exp\{-\sigma_1-\mathrm{i}\sigma_2\}=\exp\left\{-\mathrm{i}\sum_{a=1}^{3}\Omega_a\sigma_a/2\right\} \end{aligned} \tag{9.167}$$

参数 $\Omega_1=-2\mathrm{i}$, $\Omega_2=2$, $\Omega_3=0$. 两个类对应 L_p 群一个类，此类中代表元素为 $A(-\pi,\pi/4,\omega,\pi,3\pi/4,0)$，其中 $\cosh\omega=3$

$$A=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 & 2\mathrm{i} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & -1 & -2\mathrm{i} \\ -2\mathrm{i} & 0 & -2\mathrm{i} & 3 \end{pmatrix}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2T_{31}-2T_{14}} \tag{9.168}$$

显然 A 是一个固有洛伦兹变换矩阵，四个本征值都是 1，但只有两个线性无关的本征矢量，可通过相似变换 Z 化成约当标准型

$$Z=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -4 & 0 & 1 \\ 0 & -4\mathrm{i} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad Z^{-1}AZ=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{9.169}$$

七、齐次洛伦兹群的不可约表示

有了 L_p 群的不等价不可约表示，再确定陪集代表元素 τ 和 ρ 的表示矩阵，就可以知道 L_h 群的不等价不可约表示，另一代表元素 σ 可用公式 $\sigma=\tau\rho$ 计算. ρ 可与 L_h 群任意元素对易，且平方等于恒元，因而它在不可约表示中只能取常数矩阵，在单值表示中常数为 ±1. τ 的性质已在式 (9.134) 给出. O(4) 群单值表示的研究方法可以直接搬过来，但要注意 L_p 群的群空间分成四个不连续区域.

引入四阶反演群 V_4 的四个不等价不可约表示

$$V^{(1)}(\tau) = V^{(2)}(\tau) = V^{(1)}(\rho) = V^{(4)}(\rho) = 1 \ , \\ V^{(3)}(\tau) = V^{(4)}(\tau) = V^{(2)}(\rho) = V^{(3)}(\rho) = -1 \tag{9.170}$$

当 $j = k$ 时, 由 $\mathrm{L_p}$ 群的不可约表示 D^{jj} 可诱导出 $\mathrm{L_h}$ 群的四个不等价不可约表示

$$\begin{aligned} &\Delta^{jj\lambda}(A) = D^{jj}(A), \qquad A \in \mathrm{L_p} \ , \\ &\Delta^{jj\lambda}_{\mu\nu,\nu'\mu'}(\tau) = V^{(\lambda)}(\tau)\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'} \ , \\ &\Delta^{jj\lambda}(\rho) = V^{(\lambda)}(\rho)\ \mathbf{1}, \qquad 1 \leqslant \lambda \leqslant 4 \end{aligned} \tag{9.171}$$

当 $j \neq k$, 但 $j + k$ 是整数时, $\mathrm{L_p}$ 群的两个不可约表示表示空间的直和才对 $\mathrm{L_h}$ 群保持不变, 由 $\mathrm{L_p}$ 群的表示 $D^{jk} \oplus D^{kj}$ 诱导出 $\mathrm{L_h}$ 群的两个不等价不可约表示 $\Delta^{jk\pm}$

$$\begin{aligned} &\Delta^{jk\pm}(A) = D^{jk}(A) \oplus D^{kj}(A), \qquad A \in \mathrm{L_p}, \qquad \Delta^{jk\pm}(\rho) = \pm\mathbf{1}, \\ &\Delta^{jk\pm}_{\mu\nu\alpha,\nu'\mu'\beta}(\tau) = \delta_{(-\alpha)\beta}\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'}, \quad \alpha,\ \beta = \pm 1 \end{aligned} \tag{9.172}$$

其中, α 和 β 用以区分 D^{jk} 和 D^{kj} 两个表示空间. 因 $\Delta^{jk\pm}(\tau)$ 无对角元, 改变它的符号对应等价表示.

对半奇数的 $j + k$, 我们只讨论狄拉克旋量表示 $D(\mathrm{L_h})$. 仿照 SO(N) 群基本旋量表示的讨论方法, 对于四个满足反对易关系的 γ_μ 矩阵, 引入

$$\overline{\gamma}_\mu = \sum_{\nu=1}^{4} A_{\mu\nu}\gamma_\nu$$

这里为区别起见, 指标 μ 取 1~4, 而指标 a 取 1~3. 由于洛伦兹变换矩阵 A 是正交矩阵, $\overline{\gamma}_\mu$ 也满足反对易关系. 因此由 γ 矩阵的等价定理知, 存在幺模相似变换 $D(A)$

$$D(A)^{-1}\gamma_\mu D(A) = \sum_{\nu=1}^{4} A_{\mu\nu}\gamma_\nu, \qquad \det D(A) = 1 \tag{9.173}$$

$D(A)$ 的集合构成 $\mathrm{L_h}$ 群的多值表示, 生成元为

$$I_{\mu\nu} = \frac{-\mathrm{i}}{4}\ (\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu) \tag{9.174}$$

引入电荷共轭变换矩阵 C

$$C^{-1}\gamma_\mu C = -\gamma_\mu^{\mathrm{T}}, \quad C^\dagger C = \mathbf{1}, \quad C^{\mathrm{T}} = -C, \quad \det C = 1 \tag{9.175}$$

有

$$C^{-1}I_{\mu\nu}C = -I_{\mu\nu}^{\mathrm{T}}$$

对 L_p 群, 用下面条件选择表示矩阵 $D(A)$

$$C^{-1}D(A)C = \left\{D(A^{-1})\right\}^{T}, \qquad A \in L_p \tag{9.176}$$

得到 L_p 群的双值的基本旋量表示. 注意, 式 (9.176) 的右面不再能表为 $D(A)^*$. 对 L_h 群, 通常用下式来规定群空间每一连续片一个代表元素的表示矩阵

$$C^{-1}D(A)C = \frac{A_{44}}{|A_{44}|}\ \left\{D(A^{-1})\right\}^{T}, \qquad A \in L_h \tag{9.177}$$

解得

$$D(\sigma) = \pm \mathrm{i}\gamma_4, \qquad D(\tau) = \pm\gamma_4\gamma_5, \qquad D(\rho) = \pm\mathrm{i}\gamma_5 \tag{9.178}$$

从而使矩阵集合 $D(A)$ 与 L_h 群有二一对应的同态关系, 称为狄拉克旋量表示. 狄拉克旋量表示是 L_h 群的覆盖群. 对 L_p 群而言, 狄拉克旋量表示约化为两个二维不可约表示, 作为 L_p 群的覆盖群, 它们每一个都与 $SL(2, C)$ 群同构.

狄拉克旋量表示不是幺正表示. 下面计算表示矩阵的共轭矩阵的性质. 将式 (9.173) 两边取共轭

$$\begin{aligned} D(A)^{\dagger}\gamma_a D(A^{-1})^{\dagger} &= \sum_{b=1}^{3}\ A_{ab}\gamma_b\ -\ A_{a4}\gamma_4\ , \\ D(A)^{\dagger}\gamma_4 D(A^{-1})^{\dagger} &= -\sum_{b=1}^{3}\ A_{4b}\gamma_b\ +\ A_{44}\gamma_4 \end{aligned}$$

为把上式写成统一的形式, 做 γ_4 相似变换

$$\left\{\gamma_4 D(A)^{\dagger}\gamma_4\right\}\gamma_\mu\left\{\gamma_4 D(A)^{\dagger}\gamma_4\right\}^{-1} = \sum_{\nu=1}^{4}\ A_{\mu\nu}\gamma_\nu$$

由 γ 矩阵的等价定理知

$$\gamma_4 D(A)^{\dagger}\gamma_4 = cD(A)^{-1}$$

用式 (9.178) 代入, 不难确定此常数

$$\gamma_4 D(A)^{\dagger}\gamma_4 = \frac{A_{44}}{|A_{44}|}\ D(A)^{-1} \tag{9.179}$$

这就是量子场论中, 用旋量场构造洛伦兹变换的不变量时, 必须插入一个 γ_4 矩阵的原因

$$\overline{\Psi}\Psi = \Psi^{\dagger}\gamma_4\Psi \tag{9.180}$$

习 题

1. 计算下列杨图标记的 SO(6) 群不可约表示的维数

(1) $[4,2]$, (2) $[3,2]$, (3) $[4,4]$, (4) $[3,1,1]$, (5) $[3,3,1]$.

2. 将下列 SU(6) 群不可约表示, 作为 SO(6) 群的分导表示, 按 SO(6) 群不可约表示分解, 并通过计算分解式两边表示的维数来进行检验: (1) $[4,2]$, (2) $[3,2]$.

3. 计算下列 SO(N) 群不可约张量表示直乘分解的克莱布施－戈登级数, 并取 $N=7$, 计算分解式两边表示的维数来进行检验:

(1) $[2]\otimes[2]$, (2) $[2]\otimes[1,1]$, (3) $[3]\otimes[2,1]$.

4. 用方块权图方法, 在 SO(5) 群不可约表示 $[2,2]$ 的表示空间计算正交归一的基, 并把基按 SO(5) 群四阶无迹张量空间的正则张量杨表展开.

5. 分别对 SO(7) 群和 SO(8) 群计算属表示 $[2,0,\cdots,0]$ 的所有球谐函数 $\mathrm{Y}_{\boldsymbol{m}}^{[2,0,\cdots,0]}(\hat{x})$, 并把结果与图 9.1 和 9.2 比较.

6. 计算下列杨图标记的 SO(6) 群不可约旋量表示的维数:

(1) $[+s(4,2)]$, (2) $[+s(3,2)]$, (3) $[+s(4,4)]$, (4) $[+s(3,1,1)]$, (5) $[+s(3,3,1)]$.

7. 结合方块权图方法, 用二阶旋量 $\chi(\alpha)$ 的直乘形式, 分别表出 SO(7) 群和 SO(8) 群基本旋量的各正交归一的状态基 $\chi(\boldsymbol{m})$, 并指出它们的权 $\boldsymbol{m}$.

8. 讨论 SO(4) 群的类并计算它们在不可约表示 D^{jk} 中的特征标.

9. 计算下面固有洛伦兹变换 A 的六个参数

$$A(\varphi,\theta,\omega,\alpha,\beta,\gamma)=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3}/2 & (\cosh\omega)/2 & -\mathrm{i}(\sinh\omega)/2 \\ 0 & -1/2 & \sqrt{3}(\cosh\omega)/2 & -\mathrm{i}\sqrt{3}(\sinh\omega)/2 \\ 0 & 0 & \mathrm{i}\sinh\omega & \cosh\omega \end{pmatrix}$$

10. 设

$$X=-\mathrm{i}x_4\mathbf{1}+\sum_{a=1}^{3}x_a\sigma_a,\qquad M\in SL(2,C)$$

$$MXM^{\dagger}=X'=-\mathrm{i}x_4'\mathbf{1}+\sum_{a=1}^{3}x_a'\sigma_a$$

(1) 计算 $\mathrm{Tr}\,X$ 和 $\det X$, (2) 证明 $x_\mu'=\sum_\nu A_{\mu\nu}x_\nu$, 其中 A 为固有洛伦兹变换, (3) 由此证明 $\mathrm{L}_p\sim\mathrm{SL}(2,C)$, (4) 当 A 为 $R(\vec{e}_3,\varphi)$, $R(\vec{e}_2,\theta)$, 和 $A(\vec{e}_3,\mathrm{i}\omega)$ 时, 分别计算对应的 M 矩阵, (5) 对任意固有洛伦兹变换, 写出对应的 M 矩阵.

*第十章 辛 群

近年来辛几何和辛算法在物理上得到广泛应用，这些方法都与辛群及其李代数 C_ℓ 相联系. 本章讨论辛群和 C_ℓ 李代数的性质，用杨算符方法研究它们的线性表示.

10.1 实辛群和酉辛群的一般性质

7.4 节已经介绍过实辛群和酉辛群的一般性质，现在简单地复习一下. 把 2ℓ 维空间的基按下面次序排列

$$a = 1,\ \bar{1},\ 2,\ \bar{2},\ \cdots,\ \ell,\ \bar{\ell} \tag{10.1}$$

引入 2ℓ 维反对称矩阵 J

$$J = \mathbf{1}_\ell \times (\mathrm{i}\sigma_2) = -J^{-1} = -J^{\mathrm{T}}, \qquad \det\ J = 1 \tag{10.2}$$

所有满足下面条件的 2ℓ 维实赝正交矩阵 R 的集合，按照矩阵乘积，构成实辛群 $\mathrm{Sp}(2\ell, R)$

$$R^* = R, \qquad R^{\mathrm{T}}JR = J \tag{10.3}$$

$\mathrm{Sp}(2\ell, R)$ 群不是紧致李群. 所有满足下面条件的 2ℓ 维幺正矩阵 u 的集合，按照矩阵乘积，构成酉辛群 $\mathrm{USp}(2\ell)$

$$u^\dagger = u^{-1}, \qquad u^{\mathrm{T}}Ju = J \tag{10.4}$$

$\mathrm{USp}(2\ell)$ 群是紧致李群. 从定义容易证明 $RJR^{\mathrm{T}} = J$ 和 $uJu^{\mathrm{T}} = J$. 附录 27 中已证明

$$\det R = 1, \qquad \det u = 1 \tag{10.5}$$

实辛群和酉辛群的群空间都是单连通的，它们都是单纯李群，阶数为 $\ell(2\ell+1)$.

酉辛群 $\mathrm{USp}(2\ell)$ 自身表示的生成元可利用 $\mathrm{SU}(\ell)$ 群自身表示的生成元 $T^{(1)}_{jk}$, $T^{(2)}_{jk}$ 和泡利矩阵 σ_d 来表出

$$\begin{aligned} & T^{(2)}_{jk} \times \mathbf{1}_2, \qquad T^{(1)}_{jk} \times \sigma_d, \qquad T^{(1)}_{jj} \times \sigma_d/\sqrt{2} \\ & 1 \leqslant d \leqslant 3, \qquad 1 \leqslant j < k \leqslant \ell, \qquad \left(T^{(1)}_{jj}\right)_{pq} = \delta_{pq}\delta_{\nu p} \end{aligned} \tag{10.6}$$

这些生成元满足归一化条件 $\text{Tr}(T_AT_B) = \delta_{AB}$, 它保证了结构常数关于三个指标完全反对称, 也保证了基林型是负常数矩阵, 即酉辛群的实李代数是紧致的.

实辛群 $\text{Sp}(2\ell, R)$ 自身表示的生成元是纯虚矩阵, 因而只要把式 (10.6) 中的 σ_1 和 σ_3 矩阵乘 i, 变成纯虚的 τ_1 和 τ_3 矩阵

$$\tau_1 = \text{i}\sigma_1, \qquad \tau_3 = \text{i}\sigma_3 \tag{10.7}$$

就得到实辛群 $\text{Sp}(2\ell, R)$ 自身表示的生成元. 由于部分生成元添了 i, 使实辛群变成非紧致李群. 如果把 i 归到参数中去, 允许实辛群部分参数取纯虚数, 则酉辛群和实辛群的不等价不可约表示一一对应, 它们的生成元对应相同, 只是参数实数性条件不同. 这是计算非紧致李群不可约表示的标准方法. 我们已在第九章用此方法研究过洛伦兹群的不可约表示. 实辛群的自身表示当然是实表示. 酉辛群的自身表示取复共轭后, 由式 (10.6) 知, 只有含 σ_1 和 σ_3 的生成元改符号, 而这负号可以通过相似变换 $\mathbf{1} \times \sigma_2$ 消去. 因为相似变换矩阵是反对称的, 所以酉辛群的自身表示是自共轭而非实表示.

酉辛群 $\text{USp}(2\ell)$ 自身表示生成元中的对角矩阵构成酉辛群李代数的嘉当子代数

$$H_j = T^{(1)}_{jj} \times \sigma_3/\sqrt{2}, \qquad 1 \leqslant j \leqslant \ell \tag{10.8}$$

余下的生成元要组合成 H_j 的共同本征矢量, $[H_j,\ E_{\boldsymbol{\alpha}}] = \alpha_j E_{\boldsymbol{\alpha}}$, 本征值构成根矢量 $\boldsymbol{\alpha}$, 其中素根为

$$\boldsymbol{r}_\mu = \sqrt{1/2}\,(\boldsymbol{e}_\mu - \boldsymbol{e}_{\mu+1}), \qquad 1 \leqslant \mu \leqslant \ell - 1, \qquad \boldsymbol{r}_\ell = \sqrt{2}\boldsymbol{e}_\ell \tag{10.9}$$

对应的生成元为

$$\begin{aligned} E_{\pm \boldsymbol{r}_\mu} &= \left\{ T^{(1)}_{\mu(\mu+1)} \times \sigma_3 \pm \text{i}T^{(2)}_{\mu(\mu+1)} \times \mathbf{1}_2 \right\} /\sqrt{2}, \qquad 1 \leqslant \mu < \ell \\ E_{\pm \boldsymbol{r}_\ell} &= T^{(1)}_{\mu\mu} \times (\sigma_1 \pm \text{i}\sigma_2)/2 \end{aligned} \tag{10.10}$$

前 $\ell - 1$ 个素根是较短根, $d_\mu = 1/2$, 第 ℓ 个素根是较长根, $d_\ell = 1$. 除了 $\boldsymbol{r}_\ell$ 外, 相邻素根夹角为 $2\pi/3$, 但 $\boldsymbol{r}_\ell$ 与 $\boldsymbol{r}_{\ell-1}$ 的夹角是 $3\pi/4$. 因此, $\text{USp}(2\ell)$ 群的李代数是 C_ℓ.

$\text{USp}(2\ell)$ 群的基本主权为

$$\boldsymbol{w}_\mu = \sqrt{1/2}\sum_{\nu=1}^{\mu} \boldsymbol{e}_\nu, \qquad 1 \leqslant \mu \leqslant \ell \tag{10.11}$$

C_ℓ 李代数的最大根是

$$\boldsymbol{\omega} = \sqrt{2}\boldsymbol{e}_1 = 2\sum_{\mu=1}^{\ell-1} \boldsymbol{r}_\mu + \boldsymbol{r}_\ell = 2\boldsymbol{w}_1 \tag{10.12}$$

这就是说, 伴随表示的最高权是 $\boldsymbol{M} = (2, 0, \cdots, 0)$.

10.2　辛群的张量表示

既然实辛群和酉辛群的不可约表示互相一一对应, 生成元对应相同, 只是参数的实数性条件不同. 我们可以只讨论酉辛群的张量表示. 把酉辛群元素 u 看成 2ℓ 维复空间中的坐标变换矩阵

$$x_a \xrightarrow{u} x'_a = \sum_b u_{ab} x_b \tag{10.13}$$

由此可以定义关于 USp(2ℓ) 变换的 n 阶张量和张量基

$$\begin{aligned} \boldsymbol{T}_{a_1\cdots a_n} &\xrightarrow{u} (O_u \boldsymbol{T})_{a_1\cdots a_n} = \sum_{b_1\cdots b_n} u_{a_1b_1}\cdots u_{a_nb_n} \boldsymbol{T}_{b_1\cdots b_n}, \\ \boldsymbol{\Theta}_{a_1\cdots a_n} &\xrightarrow{u} O_u \boldsymbol{\Theta}_{a_1\cdots a_n} = \sum_{b_1\cdots b_n} \boldsymbol{\Theta}_{b_1\cdots b_n} u_{b_1a_1}\cdots u_{b_na_n} \end{aligned} \tag{10.14}$$

与以前一样, 外尔互反性对按 USp(2ℓ) 变换的张量同样成立, 张量空间可以用杨算符约化. 同时, 与 SO(N) 变换类似, 对 USp(2ℓ) 变换也有两个不变张量, 一个是二阶反对称张量 J_{ab}, 另一个是 2ℓ 阶完全反对称张量 $\epsilon_{a_1\cdots a_{2\ell}}$. 先讨论二阶反对称不变张量 J_{ab}

$$(O_u J)_{ab} = \sum_{cd} u_{ac} u_{bd} J_{cd} = \left(u J u^{\mathrm{T}}\right)_{ab} = J_{ab} \tag{10.15}$$

它使张量 $\sum_{a_ra_s} J_{a_ra_s} \boldsymbol{T}_{a_1\cdots a_{r-1}a_ra_{r+1}\cdots a_{s-1}a_sa_{s+1}\cdots}$ 在 USp(2ℓ) 变换中就像没有指标 a_r 和 a_s 一样

$$\begin{aligned} \sum_{a_ra_s} (O_u J_{a_ra_s} \boldsymbol{T})_{a_1\cdots a_{r-1}a_ra_{r+1}\cdots a_{s-1}a_sa_{s+1}\cdots a_n} &= \sum_{a_ra_sb_1\cdots b_n} J_{a_ra_s} u_{a_1b_1}\cdots u_{a_nb_n} \boldsymbol{T}_{b_1\cdots b_n} \\ = \sum_{b_1\cdots b_n} & u_{a_1b_1}\cdots u_{a_{r-1}b_{r-1}} u_{a_{r+1}b_{r+1}}\cdots u_{a_{s-1}b_{s-1}} u_{a_{s+1}b_{s+1}}\cdots u_{a_nb_n} \\ & \times \left(J_{b_rb_s} \boldsymbol{T}_{b_1\cdots b_{r-1}b_rb_{r+1}\cdots b_{s-1}b_sb_{s+1}\cdots}\right) \end{aligned} \tag{10.16}$$

这是关于酉辛群张量指标的收缩, 或称取迹, 只是现在的收缩是在反对称指标间进行. 要把酉辛群张量空间约化, 首先要把张量空间分解为一系列无迹张量子空间的直和, 其中无迹条件为

$$\sum_{ab} J_{ab} \boldsymbol{T}_{\cdots a\cdots b\cdots} = 0 \tag{10.17}$$

分解后得到的无迹张量子空间 $\mathcal{T}$, 再用杨算符 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}$ 投影, 得到用杨图 $[\lambda]$ 标记的对 USp(2ℓ) 群不变的无迹张量子空间 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\mathcal{T} = \mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$, 对应的表示也用杨图 $[\lambda]$ 标记, 以

后会证明它是不可约的. 张量子空间 $T_\mu^{[\lambda]}$ 的基是满足无迹条件的正则张量杨表的线性组合. 我们先来证明, 对 USp(2ℓ) 群, 用行数大于 ℓ 的杨图标记的无迹张量子空间是零空间. 证明方法是比较独立张量数目是不是小于取迹条件数. 因为证明过程与杨图后面列的指标无关, 所以为简明起见, 可以就一列的杨图来证明.

设一列的杨图有 n 格, 在正则张量杨表中每格填充的指标是反对称的, 因而互不相同. 设有 m 对指标成对地取 j 和 $\overline{j}$ 值, 这些成对的指标需要加无迹条件. 把不成对的 $n-2m$ 个指标固定起来, 计算这样的张量数目和无迹条件数. 线性无关的张量数目等于成对指标的所有可能取值数, 它等于在 $\ell-(n-2m)$ 个数中取 m 个数的组合数. 而无迹条件是把 $m-1$ 对数固定, 一对数取迹, 因而无迹条件个数等于在 $\ell-(n-2m)$ 个数中取 $m-1$ 个数的组合数. 因为在 p 个数中取 q 个数的组合数, 在 $q=p/2$ 时达最大值, 所以要求张量子空间非空的条件是 m 不大于 $\ell-(n-2m)$ 的一半, 即

$$m \leqslant [\ell-(n-2m)]/2, \qquad \text{得}\ \ n \leqslant \ell \tag{10.18}$$

证完.

再讨论 2ℓ 阶完全反对称张量 $\epsilon_{a_1\cdots a_{2\ell}}$, 它关于 USp($2\ell$) 变换不变是因为 u 的行列式为 1. 类似 SU(N) 群情况, 它可以从协变张量基诱导出逆变张量基. 但 USp(2ℓ) 群的自身表示是自共轭表示, 没有必要再研究逆变张量, 因而这完全反对称张量对研究 USp(2ℓ) 群表示的作用不大. 我们不再讨论.

为了研究用杨图 $[\lambda]$ 标记的表示的性质, 先根据式 (7.149), 在酉辛群自身表示中计算生成元的谢瓦莱基

$$\begin{aligned}
&E_\mu = T^{(1)}_{\mu(\mu+1)} \times \sigma_3 + \mathrm{i}T^{(2)}_{\mu(\mu+1)} \times \mathrm{I}_2\ , \qquad E_\ell = T^{(1)}_{\ell\ell} \times (\sigma_1 + \mathrm{i}\sigma_2)/2\ ,\\
&F_\mu = T^{(1)}_{\mu(\mu+1)} \times \sigma_3 - \mathrm{i}T^{(2)}_{\mu(\mu+1)} \times \mathrm{I}_2\ , \qquad F_\ell = T^{(1)}_{\ell\ell} \times (\sigma_1 - \mathrm{i}\sigma_2)/2\ ,\\
&H_\mu = \left\{T^{(1)}_{\mu\mu} - T^{(1)}_{(\mu+1)(\mu+1)}\right\} \times \sigma_3\ , \qquad H_\ell = T^{(1)}_{\ell\ell} \times \sigma_3
\end{aligned} \tag{10.19}$$

其中, $1 \leqslant \mu \leqslant (\ell-1)$. 它们对矢量基 $\mathbf{\Theta}_a$ 的非零作用有

$$\begin{array}{lll}
H_\mu\mathbf{\Theta}_\mu = \mathbf{\Theta}_\mu, & H_\mu\mathbf{\Theta}_{\mu+1} = -\mathbf{\Theta}_{\mu+1}, & H_\mu\mathbf{\Theta}_{\overline{\mu+1}} = \mathbf{\Theta}_{\overline{\mu+1}},\\
H_\mu\mathbf{\Theta}_{\overline{\mu}} = -\mathbf{\Theta}_{\overline{\mu}}, & H_\ell\mathbf{\Theta}_\ell = \mathbf{\Theta}_\ell, & H_\ell\mathbf{\Theta}_{\overline{\ell}} = -\mathbf{\Theta}_{\overline{\ell}},\\
E_\mu\mathbf{\Theta}_{\mu+1} = \mathbf{\Theta}_\mu, & E_\mu\mathbf{\Theta}_{\overline{\mu}} = -\mathbf{\Theta}_{\overline{\mu+1}}, & E_\ell\mathbf{\Theta}_{\overline{\ell}} = \mathbf{\Theta}_\ell,\\
F_\mu\mathbf{\Theta}_\mu = \mathbf{\Theta}_{\mu+1}, & F_\mu\mathbf{\Theta}_{\overline{\mu+1}} = -\mathbf{\Theta}_{\overline{\mu}}, & F_\ell\mathbf{\Theta}_\ell = \mathbf{\Theta}_{\overline{\ell}}
\end{array} \tag{10.20}$$

可见矢量基 $\mathbf{\Theta}_a$ 是 H_μ 和 H_ℓ 的共同本征矢量, 但在升降算符的作用下它们的排列次序使用起来不方便, 重新排列后引进新的矢量基 $\mathbf{\Phi}_\alpha$, $1 \leqslant \alpha \leqslant 2\ell$. 与式 (10.1) 的次序相比, 现在的次序是

$$1,\ 2,\ \cdots,\ \ell,\ \overline{\ell},\ \overline{\ell-1},\ \cdots,\ \overline{2},\ \overline{1}$$

即

$$\mathbf{\Phi}_\mu = \mathbf{\Theta}_\mu, \qquad \mathbf{\Phi}_{\ell+\mu} = \mathbf{\Theta}_{\overline{\ell-\mu+1}}, \qquad 1 \leqslant \mu \leqslant \ell \tag{10.21}$$

谢瓦莱基对新矢量基的非零作用为

$$\begin{aligned}
&H_\mu \mathbf{\Phi}_\mu = \mathbf{\Phi}_\mu, &&H_\mu \mathbf{\Phi}_{\mu+1} = -\mathbf{\Phi}_{\mu+1}, &&H_\mu \mathbf{\Phi}_{2\ell-\mu} = \mathbf{\Phi}_{2\ell-\mu} \\
&H_\mu \mathbf{\Phi}_{2\ell-\mu+1} = -\mathbf{\Phi}_{2\ell-\mu+1}, &&H_\ell \mathbf{\Phi}_\ell = \mathbf{\Phi}_\ell, &&H_\ell \mathbf{\Phi}_{\ell+1} = -\mathbf{\Phi}_{\ell+1} \\
&E_\mu \mathbf{\Phi}_{\mu+1} = \mathbf{\Phi}_\mu, &&E_\mu \mathbf{\Phi}_{2\ell-\mu+1} = -\mathbf{\Phi}_{2\ell-\mu}, &&E_\ell \mathbf{\Phi}_{\ell+1} = \mathbf{\Phi}_\ell \\
&F_\mu \mathbf{\Phi}_\mu = \mathbf{\Phi}_{\mu+1}, &&F_\mu \mathbf{\Phi}_{2\ell-\mu} = -\mathbf{\Phi}_{2\ell-\mu+1}, &&F_\ell \mathbf{\Phi}_\ell = \mathbf{\Phi}_{\ell+1}
\end{aligned} \tag{10.22}$$

其中, $1 \leqslant \mu \leqslant \ell - 1$.

张量基 $\mathbf{\Phi}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}$ 是矢量基 $\mathbf{\Phi}_\alpha$ 的直乘, 生成元对张量基的作用等于对每个矢量基分别作用后相加, 得到若干张量基的线性组合. 张量杨表是杨算符对张量基 $\mathbf{\Phi}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}$ 的投影. 由于外尔互反性, 生成元可以直接作用在张量基上, 然后再用杨算符投影, 得到若干张量杨表的线性组合. 根据式 (10.22), 正则张量杨表是 H_μ 和 H_ℓ 的共同本征张量, H_μ 的本征值是正则张量杨表中填 μ 和填 $2\ell-\mu$ 的格数之和, 减去填 $\mu+1$ 和填 $2\ell-\mu+1$ 的格数之和, H_ℓ 的本征值是正则张量杨表中填 ℓ 的格数减去填 $\ell+1$ 的格数. E_μ 对正则张量杨表的作用得到若干张量杨表的代数和, 其中每一个都是由原来的正则张量杨表, 把其中一个填数 $\mu+1$ 换成 μ, 或把一个填数 $2\ell-\mu+1$ 换成 $2\ell-\mu$, 在后一替换得到的张量杨表前要加负号. F_μ 对正则张量杨表的作用正好做相反的替换. 这样得到的张量杨表, 有些可能不是正则的, 它们可通过类似式 (8.23) 的对称性和福克条件化为正则张量杨表的线性组合.

与 SU(N) 群和 SO(N) 群正交归一的不可约张量基的计算方法类似, 对给定的张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$, 关键要计算最高权态的正则张量杨表, 它必须在升算符 E_μ 作用下为零, 而且是无迹的. 然后把降算符作用在作为最高权态的正则张量杨表上, 就得到其他态关于正则张量杨表的展开式, 它们自然是无迹的和正交归一的.

设杨图 $[\lambda]$ 的行数不大于 ℓ, $[\lambda]=[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_\ell]$. 在张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 中存在一个正则张量杨表, 它的每一格都填以该格所在的行数. 任一升算符 E_μ 对它的作用都为零, 因为产生的每一个张量杨表都有两个填 μ 的格子处在同一列. 这正则张量杨表不同时包含填数为 μ 和 $2\ell-\mu+1$ 的格子, 即不包含乘积 $\mathbf{\Theta}_\mu\mathbf{\Theta}_{\overline{\mu}}$, 因而是无迹的. 这就是我们要找的最高权态的正则张量杨表. 容易证明, 对其他正则张量杨表, 至少能找到一个升算符作用不为零. 不失普遍性, 设此正则张量杨表的前 $\nu-1$ 行的格子都填以行数, 第 ν 行至少有一格填数不为 ν, 例如为 $\tau>\nu$. 这格所在列其他格子的填数都不等于 $\tau-1$, 因为处在它上面的格子填数小于 $\nu\leqslant\tau-1$, 处在它下面的格子填数大于 τ. 因此这正则张量杨表在 E_τ 作用下不为零. 既然在张量子空间 $\mathcal{T}_\mu^{[\lambda]}$ 中满足最高权态条件的正则张量杨表是唯一的, 这子空间对应 USp(2ℓ) 群的不

可约表示, 而且可算得用杨图 $[\lambda]$ 描写的不可约表示的最高权 M 为

$$M_\mu = \lambda_\mu - \lambda_{\mu+1}, \qquad M_\ell = \lambda_\ell, \qquad 1 \leqslant \mu < \ell \tag{10.23}$$

这样, 我们得到了 USp(2ℓ) 群的全部有限维的不等价不可约表示, 它们都是自共轭表示. 不可约表示的表示空间的正交归一基和在此基中生成元的矩阵形式, 可用第七章介绍的方块权图方法计算, 而正交归一的张量基的展开式可由最高权态的展开式, 通过降算符作用得到.

10.3 正交归一的不可约张量基的计算

本节以 USp(6) 群 (C_3 李代数) 的二阶无迹反对称张量表示 $[1,1,0]$ 为例来计算各状态基的张量杨表形式. 该表示的最高权为 $(0,1,0)$. USp(6) 群的素根 $\boldsymbol{r}_\mu$ 与基本主权 $\boldsymbol{w}_\nu$ 的关系为

$$\boldsymbol{r}_1 = 2\boldsymbol{w}_1 - \boldsymbol{w}_2, \quad \boldsymbol{r}_2 = -\boldsymbol{w}_1 + 2\boldsymbol{w}_2 - \boldsymbol{w}_3, \quad \boldsymbol{r}_3 = -2\boldsymbol{w}_2 + 2\boldsymbol{w}_3 \tag{10.24}$$

用新基 $\boldsymbol{\Phi}_\mu$ 表出的正则张量杨表为

$$\begin{array}{|c|}\hline a \\ \hline b \\ \hline\end{array} = \mathcal{Y}^{[1,1,0]}\boldsymbol{\Phi}_{ab} = \boldsymbol{\Phi}_{ab} - \boldsymbol{\Phi}_{ba}, \qquad a < b$$

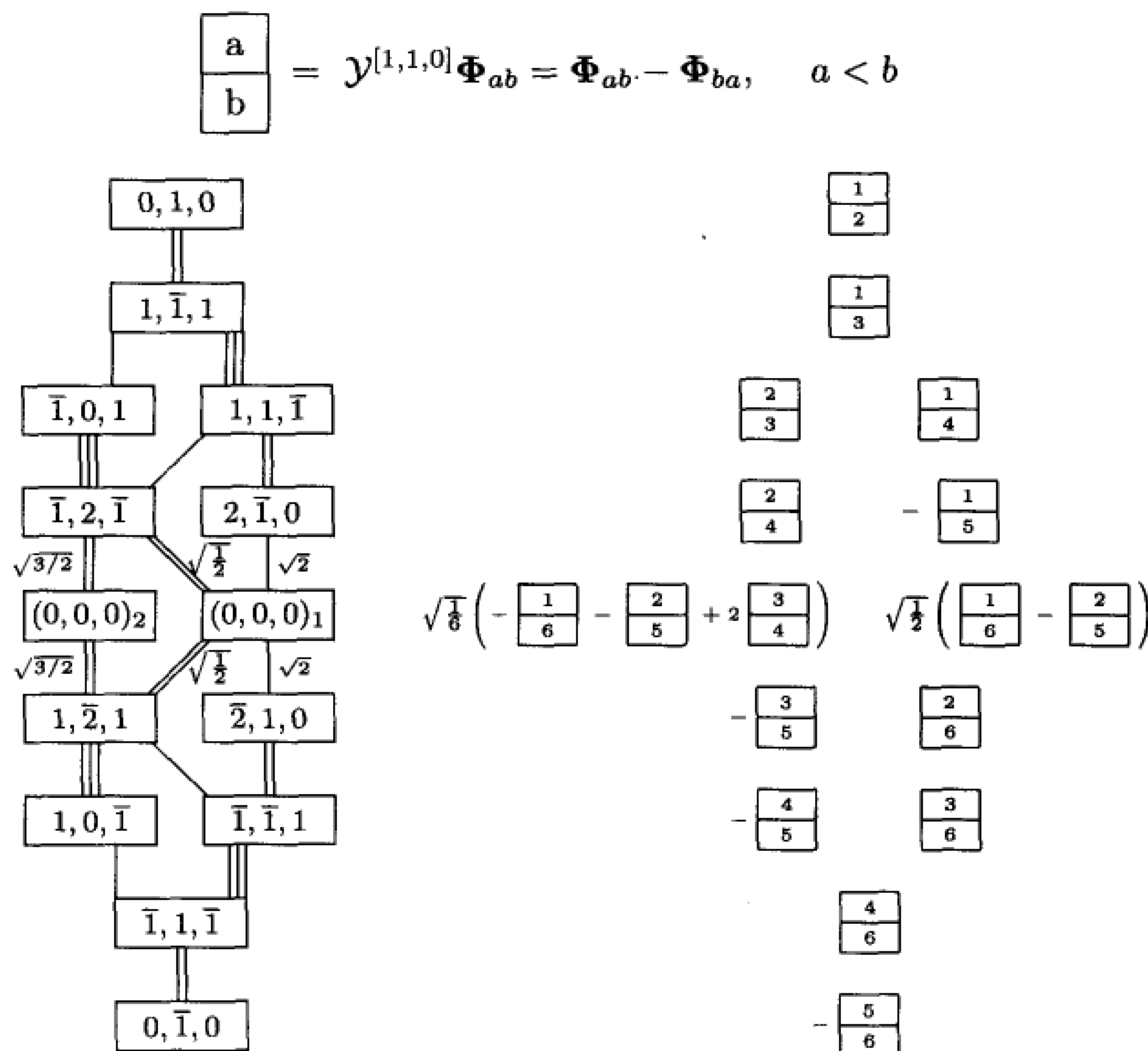


图 10.1 USp(6) 群表示 $[1,1,0]$ 的方块权图和张量基

由正则张量杨表构成的迹张量为

$$\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 6\\\hline\end{array}+\begin{array}{|c|}\hline 2\\\hline 5\\\hline\end{array}+\begin{array}{|c|}\hline 3\\\hline 4\\\hline\end{array}=\boldsymbol{\Theta}_1\boldsymbol{\Theta}_{\overline{1}}-\boldsymbol{\Theta}_{\overline{1}}\boldsymbol{\Theta}_1+\boldsymbol{\Theta}_2\boldsymbol{\Theta}_{\overline{2}}-\boldsymbol{\Theta}_{\overline{2}}\boldsymbol{\Theta}_2+\boldsymbol{\Theta}_3\boldsymbol{\Theta}_{\overline{3}}-\boldsymbol{\Theta}_{\overline{3}}\boldsymbol{\Theta}_3$$

$$=\sum_{ab}\boldsymbol{\Theta}_a J_{ab}\boldsymbol{\Theta}_b$$

最高权态及由降算符算得的其他权态如下, 同时也列于图 10.1.

$$|(0,1,0)\rangle=\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline\end{array}=\boldsymbol{\Theta}_1\boldsymbol{\Theta}_2-\boldsymbol{\Theta}_2\boldsymbol{\Theta}_1,$$

$$|(1,\overline{1},1)\rangle=F_2|(0,1,0)\rangle=\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 3\\\hline\end{array}=\boldsymbol{\Theta}_1\boldsymbol{\Theta}_3-\boldsymbol{\Theta}_3\boldsymbol{\Theta}_1,$$

$$|(\overline{1},0,1)\rangle=F_1|(1,\overline{1},1)\rangle=\begin{array}{|c|}\hline 2\\\hline 3\\\hline\end{array}=\boldsymbol{\Theta}_2\boldsymbol{\Theta}_3-\boldsymbol{\Theta}_3\boldsymbol{\Theta}_2,$$

$$|(1,1,\overline{1})\rangle=F_3|(1,\overline{1},1)\rangle=\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 4\\\hline\end{array}=\boldsymbol{\Theta}_1\boldsymbol{\Theta}_{\overline{3}}-\boldsymbol{\Theta}_{\overline{3}}\boldsymbol{\Theta}_1,$$

$$|(\overline{1},2,\overline{1})\rangle=F_3|(\overline{1},0,1)\rangle=\begin{array}{|c|}\hline 2\\\hline 4\\\hline\end{array}=\boldsymbol{\Theta}_2\boldsymbol{\Theta}_{\overline{3}}-\boldsymbol{\Theta}_{\overline{3}}\boldsymbol{\Theta}_2,$$

$$|(2,\overline{1},0)\rangle=F_2|(1,1,\overline{1})\rangle=-\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 5\\\hline\end{array}=-\boldsymbol{\Theta}_1\boldsymbol{\Theta}_{\overline{2}}+\boldsymbol{\Theta}_{\overline{2}}\boldsymbol{\Theta}_1,$$

$$\begin{aligned}|(0,0,0)_1\rangle&=\sqrt{1/2}F_1|(2,\overline{1},0)\rangle=\sqrt{1/2}\left\{\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 6\\\hline\end{array}-\begin{array}{|c|}\hline 2\\\hline 5\\\hline\end{array}\right\}\\&=\sqrt{1/2}\left\{\boldsymbol{\Theta}_1\boldsymbol{\Theta}_{\overline{1}}-\boldsymbol{\Theta}_{\overline{1}}\boldsymbol{\Theta}_1-\boldsymbol{\Theta}_2\boldsymbol{\Theta}_{\overline{2}}+\boldsymbol{\Theta}_{\overline{2}}\boldsymbol{\Theta}_2\right\},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}|(0,0,0)_2\rangle&=\sqrt{2/3}\left\{F_2|(\overline{1},2,\overline{1})\rangle-\sqrt{1/2}|(0,0,0)_1\rangle\right\}\\&=\sqrt{1/6}\left\{-\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 6\\\hline\end{array}-\begin{array}{|c|}\hline 2\\\hline 5\\\hline\end{array}+2\begin{array}{|c|}\hline 3\\\hline 4\\\hline\end{array}\right\}\\&=\sqrt{1/6}\left\{-\boldsymbol{\Theta}_1\boldsymbol{\Theta}_{\overline{1}}+\boldsymbol{\Theta}_{\overline{1}}\boldsymbol{\Theta}_1-\boldsymbol{\Theta}_2\boldsymbol{\Theta}_{\overline{2}}+\boldsymbol{\Theta}_{\overline{2}}\boldsymbol{\Theta}_2+2\boldsymbol{\Theta}_3\boldsymbol{\Theta}_{\overline{3}}-2\boldsymbol{\Theta}_{\overline{3}}\boldsymbol{\Theta}_3\right\},\end{aligned}$$

$$|(\overline{2},1,0)\rangle=\sqrt{1/2}F_1|(0,0,0)_1\rangle=\begin{array}{|c|}\hline 2\\\hline 6\\\hline\end{array}=\boldsymbol{\Theta}_2\boldsymbol{\Theta}_{\overline{1}}-\boldsymbol{\Theta}_{\overline{1}}\boldsymbol{\Theta}_2,$$

$$|(1,\overline{2},1)\rangle=\sqrt{2}F_2|(0,0,0)_1\rangle=-\begin{array}{|c|}\hline 3\\\hline 5\\\hline\end{array}=-\boldsymbol{\Theta}_3\boldsymbol{\Theta}_{\overline{2}}+\boldsymbol{\Theta}_{\overline{2}}\boldsymbol{\Theta}_3,$$

$$|(\bar{1},\bar{1},1)\rangle = F_1|(1,\bar{2},1)\rangle = \begin{array}{|c|}\hline 3 \\ \hline 6 \\ \hline\end{array} = \boldsymbol{\Theta}_3\boldsymbol{\Theta}_{\bar{1}} - \boldsymbol{\Theta}_{\bar{1}}\boldsymbol{\Theta}_3,$$

$$|(1,0,\bar{1})\rangle = F_3|(1,\bar{2},1)\rangle = -\begin{array}{|c|}\hline 4 \\ \hline 5 \\ \hline\end{array} = -\boldsymbol{\Theta}_{\bar{1}}\boldsymbol{\Theta}_{\bar{2}} + \boldsymbol{\Theta}_{\bar{2}}\boldsymbol{\Theta}_{\bar{1}},$$

$$|(\bar{1},1,\bar{1})\rangle = F_1|(1,0,\bar{1})\rangle = \begin{array}{|c|}\hline 4 \\ \hline 6 \\ \hline\end{array} = \boldsymbol{\Theta}_{\bar{3}}\boldsymbol{\Theta}_{\bar{1}} - \boldsymbol{\Theta}_{\bar{1}}\boldsymbol{\Theta}_{\bar{3}},$$

$$|(0,\bar{1},0)\rangle = F_2|(\bar{1},1,\bar{1})\rangle = -\begin{array}{|c|}\hline 5 \\ \hline 6 \\ \hline\end{array} = -\boldsymbol{\Theta}_{\bar{2}}\boldsymbol{\Theta}_{\bar{3}} + \boldsymbol{\Theta}_{\bar{3}}\boldsymbol{\Theta}_{\bar{2}}$$

10.4 辛群不可约表示维数的计算

USp(2ℓ) 群表示 $[\lambda]$ 的维数 $d_{[\lambda]}(\mathrm{USp}(2\ell))$, 可用下面的钩形规则来计算. 这规则在一定程度上与计算 SO(N) 群旋量表示维数的规则类似. 实辛群 Sp$(2\ell,R)$ 和酉辛群 USp(2ℓ) 的不可约表示维数是对应相同的. 在这钩形规则中, 表示维数表为一个分数, 分子和分母分别为给定杨图 $[\lambda]$ 的一定表中所有填数的乘积

$$d_{[\lambda]}[\mathrm{USp}(2\ell)] = \frac{Y_{Sp}^{[\lambda]}}{Y_h^{[\lambda]}} \tag{10.25}$$

仍沿用以前关于钩形路径和逆钩形路径的定义. 杨图 $[\lambda]$ 的钩形路径 $(i,\ j)$ 是一条钩形通道, 由杨图 $[\lambda]$ 第 i 行最右面格子处进入杨图, 向左走到第 i 行第 j 列处向下转弯, 在第 j 列最下面格子处离开杨图. 而逆钩形路径 $\overline{(i,\ j)}$ 与钩形路径 $(i,\ j)$ 形状相同, 只是走向相反. 两条钩形路径在杨图中经过的格子数就是第 i 行第 j 列格子的钩形数 h_{ij}. 分母的表 $Y_h^{[\lambda]}$ 是在杨图 $[\lambda]$ 各格填以该格的构形数 h_{ij}, 分母是表中所填数的乘积. 对杨图 $[\lambda]$, 按下面规则相继定义一系列的表 $Y_{Sp_a}^{[\lambda]}$, 分子的表 $Y_{Sp}^{[\lambda]}$ 是在杨图 $[\lambda]$ 各格填以上述系列中各表 $Y_{Sp_a}^{[\lambda]}$ 对应格子填数之和, 分子是表 $Y_{Sp}^{[\lambda]}$ 中所填数的乘积.

表 $Y_{Sp_a}^{[\lambda]}$ 由下面规则定义:

(1) 表 $Y_{Sp_0}^{[\lambda]}$ 是在杨图 $[\lambda]$ 各格填以 2ℓ 和容度 $m_{ij} = j - i$ 之和, 即第 i 行第 j 列格子填以 $2\ell + j - i$.

(2) 设 $[\lambda^{(1)}] = [\lambda]$. 由 $[\lambda^{(1)}]$ 开始, 相继定义一系列 $[\lambda^{(a)}]$, 其中 $[\lambda^{(a)}]$ 是由 $[\lambda^{(a-1)}]$ 移去第一行和第一列得到. 这过程直进行到 $[\lambda^{(a-1)}]$ 的行数少于 2 为止.

(3) 如果 $[\lambda^{(a)}]$ 行数大于 1, 按下法定义表 $Y_{Sp_a}^{[\lambda]}$. 在杨图 $[\lambda]$ 前 $a-1$ 行和前 $a-1$ 列都填以零, 余下部分构成杨图 $[\lambda^{(a)}]$. 设杨图 $[\lambda^{(a)}]$ 含 r 行, 在杨图 $[\lambda^{(a)}]$ 中的钩

形路径 (1, 1) 前 $r-1$ 格, 逐格填以 $\lambda_2^{(a)}$, $\lambda_3^{(a)}$, $\cdots$, $\lambda_r^{(a)}$, 在杨图 $[\lambda^{(a)}]$ 每个逆构形路径 $\overline{(i,\ 1)}$, $2 \leqslant i \leqslant r$, 前 $\lambda_i^{(a)}$ 格填以 -1. 如果几个 -1 填在同一格, 则填数相加. 其余格子都填零. 在杨图 $[\lambda^{(a)}]$ 中填数之和为零.

下面举些例子来说明维数公式 (10.25) 的用法.

例 1 USp(6) 群的表示 [3, 3, 3] 的维数

$$Y_{Sp}^{[3,3,3]} = \begin{array}{|c|c|c|}\hline 6 & 7 & 8 \\ \hline 5 & 6 & 7 \\ \hline 4 & 5 & 6 \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|c|}\hline & 3 & 3 \\ \hline -1 & -1 & \\ \hline -2 & -1 & -1 \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|c|}\hline & & \\ \hline & & 2 \\ \hline & -1 & -1 \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|}\hline 6 & 10 & 11 \\ \hline 4 & 5 & 9 \\ \hline 2 & 3 & 4 \\ \hline \end{array}$$

$$d_{[3,3,3]}[\mathrm{USp}(6)] = \frac{\begin{array}{|c|c|c|}\hline 6 & 10 & 11 \\ \hline 4 & 5 & 9 \\ \hline 2 & 3 & 4 \\ \hline \end{array}}{\begin{array}{|c|c|c|}\hline 5 & 4 & 3 \\ \hline 4 & 3 & 2 \\ \hline 3 & 2 & 1 \\ \hline \end{array}} = 11 \times 5 \times 3 \times 2 = 330$$

例 2 USp(2ℓ) 群一行杨图 $[n]$ 对应表示的维数. 对只有一行杨图 $[n]$ 的表示空间, 不存在无迹条件.

$$d_{[n]}[\mathrm{USp}(2\ell)] = d_{[n]}[\mathrm{SU}(2\ell)] = \begin{pmatrix} 2\ell+n-1 \\ n \end{pmatrix}. \tag{10.26}$$

例 3 USp(2ℓ) 群一列杨图 $[1^n]$ 对应表示的维数

$$Y_{Sp}^{[1^n]} = \begin{array}{|c|}\hline 2\ell \\ \hline 2\ell-1 \\ \hline \vdots \\ \hline 2\ell-n+2 \\ \hline 2\ell-n+1 \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|}\hline 1 \\ \hline 1 \\ \hline \vdots \\ \hline 1 \\ \hline -n+1 \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|}\hline 2\ell+1 \\ \hline 2\ell \\ \hline \vdots \\ \hline 2\ell-n+3 \\ \hline 2\ell-2n+2. \\ \hline \end{array}$$

$$d_{[1^n]}[\mathrm{USp}(2\ell)] = \frac{(2\ell+1)!(2\ell-2n+2)}{n!(2\ell-n+2)!}. \tag{10.27}$$

例 4 USp(2ℓ) 群两行杨图 $[n, m]$ 对应表示的维数

$$Y_{Sp}^{[n,m]} = \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|}\hline 2\ell & \cdots & 2\ell+m-1 & \cdots & 2\ell+n-2 & 2\ell+n-1 \\ \hline 2\ell-1 & \cdots & 2\ell+m-2 \\ \cline{1-3} \end{array}$$

$$+ \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|}\hline 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & m \\ \hline -1 & \cdots & -1 \\ \cline{1-3} \end{array}$$

$$= \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|}\hline 2\ell & \cdots & 2\ell+m-1 & \cdots & 2\ell+n-2 & 2\ell+n+m-1 \\ \hline 2\ell-2 & \cdots & 2\ell+m-3 \\ \cline{1-3} \end{array}$$

$Y_h^{[n,m]}$ =
<table>
<tr><td>n+1</td><td>⋯</td><td>n−m+2</td><td>n−m</td><td>⋯</td><td>1</td></tr>
<tr><td>m</td><td>⋯</td><td>1</td></tr>
</table>

$$d_{[n,m]}[\mathrm{USp}(2\ell)] = \frac{(n-m+1)(2\ell+n+m-1)(2\ell+n-2)!(2\ell+m-3)!}{(n+1)!m!(2\ell-1)!(2\ell-3)!} \tag{10.28}$$

对 USp(4) 群和 USp(6) 群有

$$\begin{aligned} d_{[n,m]}[\mathrm{USp}(4)] &= (n-m+1)(n+m+3)(n+2)(m+1)/6 \\ d_{[n,m]}[\mathrm{USp}(6)] &= (n-m+1)(n+m+5)(n+4)(n+3)(n+2) \\ &\quad \times(m+3)(m+2)(m+1)/720\ . \end{aligned} \tag{10.29}$$

10.5 简单的物理应用

辛群在物理上有重要应用. 有 ℓ 个自由度的经典系统, 哈密顿方程表为

$$\frac{\mathrm{d}q_j}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial p_j}\ , \qquad \frac{\mathrm{d}p_j}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \tag{10.30}$$

把坐标 q_j 和动量 p_j 按下面次序排列起来, 构成 2ℓ 维相空间的坐标 x_a

$$x_a = (q_1,\ p_1,\ q_2,\ p_2,\ \cdots,\ q_\ell,\ p_\ell) \tag{10.31}$$

则哈密顿方程可以统一地表达成

$$\frac{\mathrm{d}x_a}{\mathrm{d}t} = \sum_b J_{ab}\frac{\partial H}{\partial x_b}\ , \qquad \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = J\frac{\partial H}{\partial x} \tag{10.32}$$

后式是哈密顿方程的矩阵形式. 设 $\mathrm{d}x_a$ 满足哈密顿方程, 则经过辛变换后

$$\mathrm{d}z_a = \sum_b R_{ab}\mathrm{d}x_b\ , \qquad R_{ab} = \frac{\partial z_a}{\partial x_b}\ , \qquad R^TJR = J \tag{10.33}$$

$\mathrm{d}z_a$ 仍满足哈密顿方程

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}z_a}{\mathrm{d}t} &= \sum_b R_{ab}\frac{\mathrm{d}x_b}{\mathrm{d}t} = \sum_{bc} R_{ab}J_{bc}\sum_r \frac{\partial z_r}{\partial x_c}\frac{\partial H}{\partial z_r} \\ &= \sum_r \left(RJR^T\right)_{ar}\frac{\partial H}{\partial z_r} = \sum_r J_{ar}\frac{\partial H}{\partial z_r} \end{aligned}$$

因此式 (10.32) 称为经典哈密顿方程的辛形式.

用计算机求解经典运动方程时, 通常采用龙格 (Runge)- 库塔 (Kutta) 法, 这方法没有反映经典运动方程的特征, 因而在大量重复的计算中, 误差会积累起来, 造成

计算结果与真实轨道严重偏离. 例如, 回旋加速器中粒子的运行, 由于旋转的圈数太大, 计算结果偏差就会超过允许值. 对人造卫星运行的计算也有类似情况. 如果计算的每一步都能反映哈密顿方程的特征, 即做辛变换, 误差积累就会大大减少

$$z_a = z_a^{(0)} + \tau \sum_b J_{ab} \frac{\partial H(x)}{\partial z_b}, \qquad x_a = \left(z_a + z_a^{(0)}\right)/2 \tag{10.34}$$

其中,τ 为步长. 冯康教授对此有深入的研究, 具体细节请参考他的文章 (见文献 [28]).

习　题

1. 用钩形规则计算 USp(6) 群和 USp(8) 群用下列杨图标记的不可约表示维数: [3], $[1^3]$, [3, 3, 2], [3, 2, 1], [4, 3, 2, 1].

2. 用钩形规则计算 USp(2ℓ) 群, $\ell \geqslant 3$, 用三行杨图 $[n, m, p]$ 标记的不可约表示维数, 并检验第 1 题的计算结果.

3. USp(6) 群有九个正根, 试在自身表示中写出对应这些正根生成元的矩阵形式.

4. 用 USp(6) 群三阶张量基 Θ_{abc} 表出 USp(6) 群不可约表示 [1, 1, 1] 的正交归一的张量基.

5. 用主权图方法计算 USp(6) 群直乘表示 $[1,1,0] \times [1,1,0]$ 约化的克莱布施 - 戈登级数, 和级数中出现的各不可约表示最高权态的展开式.

6. 计算 C_3 李代数直乘表示 $(0,2,0) \times (1,0,0)$ 分解的克莱布施 - 戈登级数, 其中各有关表示维数, 外尔轨道长度 ($O.S.$) 和包含各主权重数列于下表:

表示	维数	OS	(1,0,0)	(0,0,1)	(1,1,0)	(3,0,0)	(0,1,1)	(2,0,1)	(1,2,0)
(1,0,0)	6	6	1						
(0,0,1)	14	8	1	1					
(1,1,0)	64	24	4	2	1				
(3,0,0)	56	6	3	1	1	1			
(0,1,1)	126	24	5	3	2	0	1		
(2,0,1)	216	24	7	6	3	1	1	1	
(1,2,0)	350	24	11	7	5	2	2	1	1

附　录

附录 1　几种常用的矩阵

一、幺正矩阵

若 R 矩阵的共轭矩阵等于其逆矩阵, 则 R 称为幺正矩阵

$$R^\dagger = R^{-1}, \qquad R^\dagger R = RR^\dagger = 1 \tag{A1.1}$$

幺正矩阵的行列式模为 1. 幺正矩阵相乘仍为幺正矩阵, 在幺正相似变换中, 幺正矩阵的幺正性保持不变. 把式 (A1.1) 写成矩阵元素形式

$$\begin{aligned} \sum_{\rho} \left(R^\dagger\right)_{\mu\rho} R_{\rho\nu} = \sum_{\rho} R^*_{\rho\mu} R_{\rho\nu} = \delta_{\mu\nu}, \\ \sum_{\rho} R_{\mu\rho} \left(R^\dagger\right)_{\rho\nu} = \sum_{\rho} R_{\mu\rho} R^*_{\nu\rho} = \delta_{\mu\nu} \end{aligned} \tag{A1.2}$$

即幺正矩阵的各列作为列矩阵互相正交归一, 它的各行矩阵也互相正交归一. 幺正矩阵的作用不改变列矩阵的内积, 即对任意同维列矩阵 $\underline{a}$ 和 $\underline{b}$, 有

$$(R\underline{a})^\dagger \ (R\underline{b}) = \underline{a}^\dagger \ R^\dagger R \ \underline{b} = \underline{a}^\dagger \ \underline{b} \tag{A1.3}$$

设 $R\underline{a_1} = \lambda_1 \underline{a_1}$, $R\underline{a_2} = \lambda_2 \underline{a_2}$, 则 $0 \neq \underline{a_1}^\dagger \underline{a_1} = \left(R\underline{a_1}\right)^\dagger \left(R\underline{a_1}\right) = |\lambda_1|^2 \underline{a_1}^\dagger \underline{a_1}$, 故 $|\lambda_1|^2 = 1$, 即幺正矩阵的本征值模为 1. 又因 $\underline{a_1}^\dagger \ \underline{a_2} = \left(R\underline{a_1}\right)^\dagger \ \left(R\underline{a_2}\right) = \lambda_1^* \lambda_2 \underline{a_1}^\dagger \ \underline{a_2}$, 若 $\lambda_1 \neq \lambda_2$, 则 $\lambda_1^* \lambda_2 \neq 1$, 故 $\underline{a_1}^\dagger \ \underline{a_2} = 0$, 即幺正矩阵不同本征值的本征列矩阵互相正交.

现在来证明, 幺正矩阵一定可以通过幺正相似变换对角化. 解久期方程 (1.39) 得 R 的某一个本征值 λ_1 及相应归一化的本征列矩阵 $\underline{S^{(1)}_{.1}}$. 任选一组正交归一的列矩阵, 以 $\underline{S^{(1)}_{.1}}$ 为其中第一个列矩阵, 把它们排列起来构成 $S^{(1)}$. R 矩阵经 $S^{(1)}$ 相似变换后仍是幺正矩阵, 矩阵第一列只有第一行元素为 λ_1, 其余元素都为零. 因 $|\lambda_1|^2 = 1$, 由矩阵幺正性可知, 矩阵第一行其他元素也为零, 即

$$\left(S^{(1)}\right)^{-1} RS^{(1)} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & R^{(1)} & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

余下的子矩阵 $R^{(1)}$ 仍是幺正的, 可以重复前面的步骤, 通过一系列幺正相似变换把 R 矩阵对角化. 证完. 因此, m 维幺正矩阵有 m 个互相正交的本征列矩阵.

二、厄米矩阵

若矩阵与其共轭矩阵相等, 则此矩阵称为厄米矩阵

$$R^{\dagger} = R\,, \qquad R^*_{\mu\nu} = R_{\nu\mu} \tag{A1.4}$$

厄米矩阵的对角元素是实数, 非对角元素成对地互为复共轭. 厄米矩阵之和是厄米矩阵. 在幺正相似变换中, 厄米矩阵的厄米性保持不变. 对任意同维列矩阵 $\underline{a}$ 和 $\underline{b}$, 厄米矩阵 R 满足

$$(R\underline{a})^{\dagger}\ \underline{b} = \underline{a}^{\dagger}\ R\ \underline{b} \tag{A1.5}$$

设 $R\underline{a_1} = \lambda_1\underline{a_1}$, $R\underline{a_2} = \lambda_2\underline{a_2}$, 则 $\lambda_1^*\left(\underline{a_1}^{\dagger}\ \underline{a_1}\right) = \left(R\underline{a_1}^{\dagger}\right)\underline{a_1} = \underline{a_1}^{\dagger}R\underline{a_1} = \lambda_1\left(\underline{a_1}^{\dagger}\underline{a_1}\right)$, 故 $\lambda_1^* = \lambda_1$, 即厄米矩阵的本征值是实数. 又因 $\lambda_1\underline{a_1}^{\dagger}\underline{a_2} = \left(R\underline{a_1}\right)^{\dagger}\ \underline{a_2} = \underline{a_1}^{\dagger}R\underline{a_2} = \lambda_2\underline{a_1}^{\dagger}\underline{a_2}$, 若 $\lambda_1 \neq \lambda_2$, 则 $\underline{a_1}^{\dagger}\ \underline{a_2} = 0$, 即厄米矩阵不同本征值的本征列矩阵互相正交.

厄米矩阵一定可以通过幺正相似变换对角化. 证明方法与关于幺正矩阵的证明类似. 厄米矩阵在经 $S^{(1)}$ 相似变换后仍是厄米矩阵, 矩阵第一列元素除第一行外都为零. 而由矩阵的厄米性可知, 矩阵第一行元素除第一列外也只能为零. 余下的证法相同. 因此, m 维厄米矩阵有 m 个互相正交的本征列矩阵.

本征值都大于零的厄米矩阵称为正定的厄米矩阵, 本征值不小于零的厄米矩阵称为半正定的厄米矩阵. 类似地可以定义负定和半负定的厄米矩阵. 形如 $R^{\dagger}R$ 的非奇矩阵是正定的厄米矩阵.

三、正交矩阵和实正交矩阵

若 R 矩阵的转置等于其逆矩阵, 则 R 称为正交矩阵

$$R^{\mathrm{T}} = R^{-1}\,, \qquad R^{\mathrm{T}}R = RR^{\mathrm{T}} = \mathbf{1} \tag{A1.6}$$

正交矩阵的行列式等于 $+1$ 或 -1. 正交矩阵的乘积仍是正交矩阵, 在正交相似变换中, 正交矩阵的正交性保持不变. 正交矩阵的列 (或行) 矩阵满足

$$\sum_{\rho} R_{\rho\mu}R_{\rho\nu} = \sum_{\rho} R_{\mu\rho}R_{\nu\rho} = \delta_{\mu\nu} \tag{A1.7}$$

在式 (1.53) 的内积定义下, 正交矩阵的各列 (或行) 矩阵互相正交. 在这种内积下, 正交矩阵保持列矩阵内积不变

$$(R\ \underline{a})^{\mathrm{T}}\ (R\ \underline{b}) = \underline{a}^{\mathrm{T}}\ \underline{b} \tag{A1.8}$$

设 $\underline{a}$ 为正交矩阵 R 的本征列矩阵, $R\underline{a} = \lambda\underline{a}$, 本征值 $\lambda \neq \pm 1$, 则

$$\underline{a}^{\mathrm{T}}\ \underline{a} = (R\ \underline{a})^{\mathrm{T}}\ (R\ \underline{a}) = \lambda^2\underline{a}^{\mathrm{T}}\ a = 0 \tag{A1.9}$$

即本征值不为 ±1 的本征列矩阵分量平方和为零.

矩阵元素是实数的正交矩阵称为实正交矩阵. 实正交矩阵既是正交矩阵, 又是幺正矩阵, 因而同时具有两类矩阵的性质. 实正交矩阵的列 (或行) 矩阵互相正交归一, 行列式为 +1 或 −1. 对任意同维列矩阵 a 和 b, 实正交矩阵 R 满足

$$(R\ \underline{a})^{\dagger}\ (R\ \underline{b}) = \underline{a}^{\dagger}\ \underline{b}\ , \qquad (R\ \underline{a})^{\mathrm{T}}\ (R\ \underline{b}) = \underline{a}^{\mathrm{T}}\ \underline{b} \tag{A1.10}$$

实正交矩阵的本征值模为 1, 复本征值两两成对, 互为复共轭, 对应的本征列矩阵也互为复共轭. 不同本征值的本征列矩阵互相正交. 在本征值为 ±1 时本征列矩阵可组合成实列矩阵. 在本征值不为 ±1 时本征列矩阵的分量平方和为零. 实正交矩阵的乘积仍为实正交矩阵, 在实正交相似变换中, 实正交矩阵的实正交性保持不变. 实正交矩阵存在与矩阵维数相同个数的互相正交的本征列矩阵, 但本征列矩阵不一定都是实的, 因而实正交矩阵一定可以通过幺正相似变换对角化, 但不一定能通过实正交相似变换对角化.

四、实对称矩阵

实的厄米矩阵称为实对称矩阵. 实对称矩阵之和仍是实对称矩阵. 在实正交相似变换中矩阵的实对称性保持不变. 实对称矩阵的本征值是实数, 本征列矩阵可组合成实列矩阵. 因此 m 维实对称矩阵有 m 个互相正交归一的实本征列矩阵, 即实对称矩阵一定可以通过实正交相似变换对角化.

附录 2　点群分解为循环子群的乘积

在晶体理论中, 经常把点群表达成按一定次序排列的若干循环子群的乘积形式. 这些循环子群元素的乘积不一定能对易, 但它们的乘积没有重复. 把它们的元素按给定次序乘起来, 能唯一确定地表达出群中每一个元素. 循环子群 C_N 代表一个 N 次轴. 在晶体理论中规定沿 z 轴方向的 N 次轴用不带撇的 C_N 标记, 沿其他方向的高次轴 ($N>2$) 用带一撇的 C'_N 标记, 沿 x 方向的二次轴用带一撇的 C'_2 标记, 沿其他方向的二次轴用带两撇的 C''_N 标记.

采用第二章所用的符号. C_N 群本身就是循环群. D_N 群可表为 $\mathrm{C}_N\mathrm{C}'_2$, $S_j = T^{j-1}S_1$. T 群可表为 $\mathrm{C}'_3\mathrm{C}_2\mathrm{C}'_2$, 三个循环子群的生成元分别为 R_1, T_z^2 和 T_x^2. 除循环子群的元素外, T 群元素表为如下乘积形式

$$\begin{aligned} &T_y^2 = T_z^2 T_x^2, \qquad R_2 = R_1 T_z^2 T_x^2, \qquad R_3 = R_1 T_x^2, \qquad R_4 = R_1 T_z^2, \\ &R_2^2 = R_1^2 T_z^2, \qquad R_3^2 = R_1^2 T_z^2 T_x^2, \qquad R_4^2 = R_1^2 T_x^2 \end{aligned} \tag{A2.1}$$

O 群可表为 $\mathrm{C}'_3\mathrm{C}_4\mathrm{C}''_2$, 三个循环子群的生成元分别为 R_1, T_z 和 S_1. 除 T 群元素

$R_4 = R_1T_z^2$, $R_2^2 = R_1^2T_z^2$ 和循环子群元素外, 群 O 其他元素表为

$$\begin{array}{lllll} T_y^3 = R_1S_1, & T_x = R_1^2S_1, & T_y^2 = T_zS_1, & R_2 = R_1T_zS_1, & R_3^2 = R_1^2T_zS_1, \\ S_5 = R_1T_z, & T_x^3 = R_1^2T_z, & S_2 = T_z^2S_1, & S_6 = R_1T_z^2S_1, & S_4 = R_1^2T_z^2S_1, \\ T_y = R_1T_z^3, & S_3 = R_1^2T_z^3, & T_x^2 = T_z^3S_1, & R_3 = R_1T_z^3S_1, & R_4^2 = R_1^2T_z^3S_1 \end{array} \tag{A2.2}$$

I 群每个元素都可表为 T_0 的幂次和子群 T 元素的乘积, 即 $T_0^a\left(R_6^bS_1^cS_{12}^d\right)$, 每个元素对应的指数列于表 A2.1 中. 因为 $R_6 = S_1\left(T_0^2S_1T_0^{-1}\right)$ 和 $S_{12} = \left(T_0^2S_1T_0^{-1}\right)^{-1}R_6$, 所以 I 群的生成元是 S_1 和 T_0.

表 A2.1　点群 I 元素表为四个循环子群元素的乘积: $T_0^aR_6^bS_1^cS_{12}^d$

	E	S_1	S_2	S_3	S_4	S_5	S_6	S_7	S_8	S_9	S_{10}	S_{11}	S_{12}	S_{13}	S_{14}
a	0	0	4	1	4	1	2	2	0	3	3	3	0	2	4
b	0	0	1	2	2	1	2	1	0	1	2	0	0	0	0
c	0	1	0	1	0	1	1	0	1	1	0	0	0	0	0
d	0	0	1	0	1	1	1	0	1	0	0	1	1	1	1

	S_{15}	T_0	T_0^2	T_0^3	T_0^4	T_1	T_1^2	T_1^3	T_1^4	T_2	T_2^2	T_2^3	T_2^4	T_3	T_3^2
a	1	1	2	3	4	2	1	4	3	4	1	3	2	2	4
b	0	0	0	0	0	1	2	2	1	2	1	2	0	2	0
c	0	0	0	0	0	0	1	0	1	1	0	1	1	0	1
d	1	0	0	0	0	1	1	0	1	0	0	1	0	1	1

	T_3^3	T_3^4	T_4	T_4^2	T_4^3	T_4^4	T_5	T_5^2	T_5^3	T_5^4	R_1	R_1^2	R_2	R_2^2	R_3
a	3	1	4	2	1	3	3	2	4	1	3	1	0	0	3
b	1	1	1	1	0	2	0	2	1	2	1	0	2	1	2
c	0	0	1	1	1	1	1	0	1	0	0	1	1	0	0
d	0	1	1	0	1	0	0	0	0	1	1	0	0	1	1

	R_3^2	R_4	R_4^2	R_5	R_5^2	R_6	R_6^2	R_7	R_7^2	R_8	R_8^2	R_9	R_9^2	R_{10}	R_{10}^2
a	2	0	0	4	2	0	0	3	4	1	4	1	2	0	0
b	2	1	2	0	1	1	2	0	2	1	1	2	0	2	1
c	1	1	0	1	1	0	0	1	1	1	0	0	1	1	1
d	0	1	1	0	1	0	0	1	1	0	0	0	1	1	0

附录 3　第三章定理一的证明

先证定理第一部分. 对于给定的表示 $D(G)$, 要找出相似变换 X, 使下式成立

$$\overline{D}(R) = X^{-1}D(R)X, \qquad \overline{D}(R)^{\dagger}\overline{D}(R) = \mathbf{1} \tag{A3.1}$$

把前式代入后式得

$$D(R)^{\dagger}\left(XX^{\dagger}\right)^{-1}D(R) = \left(XX^{\dagger}\right)^{-1}$$

由重排定理可以证明如下定义的 H 矩阵满足此性质

$$\begin{aligned} H &\equiv \sum_{S\in G} D(S)^\dagger D(S), \\ D(R)^\dagger H D(R) &= D(R)^\dagger \left(\sum_{S\in G} D(S)^\dagger D(S) \right) D(R) \\ &= \sum_{S\in G} D(SR)^\dagger D(SR) = \sum_{S\in G} D(S)^\dagger D(S) = H \end{aligned} \tag{A3.2}$$

对 S 求和与对 SR 求和, 区别只在于求和项的排列次序不同, 因而相等. 对给定的表示 $D(G)$, H 矩阵是已知的, 它显然是正定的厄米矩阵. 现在需要把它拆开来, 找到相似变换矩阵 X

$$\left(XX^\dagger\right)^{-1} = H \tag{A3.3}$$

通过幺正的相似变换 U 把 H 矩阵对角化, 对角元是正实数

$$\Gamma = U^{-1}HU , \qquad \Gamma_{\mu\mu} > 0$$

令 $\Gamma'_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} \left(\Gamma_{\mu\mu}\right)^{-1/2}$, 则 $X = U\Gamma' U^{-1}$ 满足式 (A3.3).

定理的第二部分是已知 $D(G)$ 和 $\overline{D}(G)$ 都是幺正表示, 它们通过非幺正的相似变换 X 相联系

$$\overline{D}(R) = X^{-1}D(R)X \tag{A3.4}$$

要在式 (A3.4) 上再做一个相似变换 Y, 它不改变 $\overline{D}(G)$, 但使相似变换 (XY) 是幺正的, 即 Y 满足

$$(XY)^\dagger (XY) = \mathbf{1} , \qquad Y^{-1}\overline{D}(R)Y = \overline{D}(R) \tag{A3.5}$$

由第一式得

$$H_1 \equiv X^\dagger X = \left(YY^\dagger\right)^{-1}$$

但由式 (A3.4), $X\overline{D}(R) = D(R)X$, 易证 H_1 可与 $\overline{D}(R)$ 对易

$$\overline{D}(R)^{-1} H_1 \overline{D}(R) = \left\{X\overline{D}(R)\right\}^\dagger \left\{X\overline{D}(R)\right\} = \left\{D(R)X\right\}^\dagger \left\{D(R)X\right\} = H_1$$

用前一部分证明中用过的方法, 同样可由 H_1 计算出 Y 矩阵. 具体说, H_1 也是正定的厄米矩阵, 可通过幺正相似变换 V 对角化, 对角元是正实数

$$\Gamma_1 = V^{-1}H_1V , \qquad \left(\Gamma_1\right)_{\mu\mu} > 0$$

取 $\left(\Gamma'_1\right)_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} \left(\Gamma_1\right)_{\mu\mu}^{-1/2}$, 得 $Y = V\Gamma'_1 V^{-1}$. 由于 $V^{-1}\overline{D}(R)V$ 可与 Γ_1 对易, 它也必可与 Γ'_1 对易, 因而式 (A3.5) 满足. 证完.

附录 4　点群的克莱布施 - 戈登系数

直乘表示通过相似变换 C^{jk} 约化,

$$\left(C^{jk}\right)^{-1}\left[D^j(R)\times D^k(R)\right]C^{jk}=\bigoplus_J a_J D^J(R) \tag{A4.1}$$

等式右面的求和式称为克莱布施 - 戈登级数, 相似变换矩阵 C^{jk} 称为克莱布施 - 戈登矩阵, 矩阵元素称为克莱布施 - 戈登系数. 可以有多种方法列举克莱布施 - 戈登系数. 对简单的群, 可直接写出克莱布施 - 戈登矩阵. 对 I 群, 可用列表法列出不为零的系数. 恒等表示与任一表示 D^j 的直乘, 仍等于表示 D^j, 不必列出.

一、D_3 群的克莱布施–戈登系数

D_3 群的特征标表见表 3.7. 二维不可约表示取式 (2.10) 的形式

$$\begin{aligned}&\left(C^{BE}\right)^{-1}\left[D^B(R)\times D^E(R)\right]C^{BE}=D^E(R),\\&\left(C^{EE}\right)^{-1}\left[D^E(R)\times D^E(R)\right]C^{EE}=D^A(R)\oplus D^B(R)\oplus D^E(R)\end{aligned} \tag{A4.2}$$

$$C^{BE}=\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix},\qquad C^{EE}=\begin{pmatrix}1&0&-1&0\\0&-1&0&1\\0&1&0&1\\1&0&1&0\end{pmatrix} \tag{A4.3}$$

二、D_N 群的克莱布施–戈登系数

当 $N=2n+1$ 时, D_{2n+1} 群有两个不等价的一维表示 D^A 和 D^B, n 个二维不等价不可约表示 D^{E_j}. 二维表示有两种常用的表象, 表示矩阵分别由式 (3.71) 和 (3.73) 给出, 它们通过相似变换 X 相联系

$$X=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&-\mathrm{i}\\1&\mathrm{i}\end{pmatrix}$$

我们采用式 (3.73) 的表象. 如果把两个一维表示按式 (3.72) 直和起来, 看成 D^{E_0} 表示, 并把 D^{E_j} 表示的指标 j 按周期 N 延拓, 即

$$\overline{D}^{E_0}(R)=\begin{pmatrix}D^A(R)&0\\0&D^B(R)\end{pmatrix},\qquad \overline{D}^{E_{j+N}}(R)=\overline{D}^{E_j}(R)=\sigma_3\overline{D}^{E_{-j}}(R)\sigma_3 \tag{A4.4}$$

则有

$$\left(C^{jk}\right)^{-1}\left(\overline{D}^{E_j}\times\overline{D}^{E_k}\right)C^{jk}=\overline{D}^{E_{j-k}}\oplus\overline{D}^{E_{j+k}},\quad C^{jk}=\begin{pmatrix}1&0&-1&0\\0&-1&0&-1\\0&1&0&-1\\1&0&1&0\end{pmatrix} \tag{A4.5}$$

容易检验, 式 (A4.2) 和 (A4.3) 是式 (A4.5) 的特殊情况.

当 $N=2n$ 时, D_{2n} 群有四个不等价的一维表示和 $n-1$ 个二维不等价不可约表示 D^{E_j}. 二维表示有两种常用的表象, 表示矩阵分别由式 (3.76) 和 (3.78) 给出, 它们也通过相似变换 X 相联系. 我们采用式 (3.78) 的表象. 如果把四个一维表示按式 (3.77) 直和起来, 看成 D^{E_0} 和 D^{E_n} 表示, 并把 D^{E_j} 表示的下标按周期 N 延拓, 即

$$\overline{D}^{E_0}(R)=\begin{pmatrix}D^{A_1}(R)&0\\0&D^{A_2}(R)\end{pmatrix},\qquad\overline{D}^{E_n}(R)=\begin{pmatrix}D^{B_1}(R)&0\\0&D^{B_2}(R)\end{pmatrix},$$

$$\overline{D}^{E_{j+N}}(R)=\overline{D}^{E_j}(R)=\sigma_3\overline{D}^{E_{-j}}(R)\sigma_3 \tag{A4.6}$$

则仍有式 (A4.5).

三、T 群的克莱布施-戈登系数

T 群有三个一维, 一个三维不等价不可约表示, 特征标表由表 3.8 给出. 三维表示采用式 (3.59) 的表象, 有

$$\begin{aligned}&\left(C^{ET}\right)^{-1}\left[D^E(R)\times D^T(R)\right]C^{ET}=D^T(R),\\&\left(C^{E'T}\right)^{-1}\left[D^{E'}(R)\times D^T(R)\right]C^{E'T}=D^T(R),\\&\left(C^{TT}\right)^{-1}\left[D^T(R)\times D^T(R)\right]C^{TT}=D^A(R)\oplus D^E(R)\oplus D^{E'}(R)\oplus D^T(R)\oplus D^T(R)\end{aligned} \tag{A4.7}$$

$$C^{ET}=\left(C^{E'T}\right)^*=\mathrm{diag}\{\omega,\ \omega^2,\ 1\},$$

$$C^{TT}=\begin{pmatrix}1&1&1&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&0&0&0&1\\1&\omega^2&\omega&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&1&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&1&0&0\\1&\omega&\omega^2&0&0&0&0&0&0\end{pmatrix} \tag{A4.8}$$

四、O 群的克莱布施-戈登系数

O 群有两个一维, 一个二维和两个三维不等价不可约表示, 特征标表由表 3.9 给出. 前三个表示是 O 群关于 D_2 子群的商群的表示. 商群同构于 D_3 群. 这些表示的直乘分解完全与 D_3 群表示的直乘分解相同. 采用式 (3.60)~(3.62) 给出的表象, 其他表示的直乘分解为

$$
\begin{aligned}
&D^B \times D^{T_1} = D^{T_2}, \qquad \left(C^{ET}\right)^{-1}\left(D^E \times D^{T_1}\right)C^{ET} = D^{T_1} \oplus D^{T_2},\\
&D^B \times D^{T_2} = D^{T_1}, \qquad \left(C^{ET}\right)^{-1}\left(D^E \times D^{T_2}\right)C^{ET} = D^{T_2} \oplus D^{T_1},\\
&\left(C^{TT}\right)^{-1}\left(D^{T_1} \times D^{T_1}\right)C^{TT} = \left(C^{TT}\right)^{-1}\left(D^{T_2} \times D^{T_2}\right)C^{TT}\\
&\qquad\qquad = D^A \oplus D^E \oplus D^{T_1} \oplus D^{T_2},\\
&\left(C^{TT'}\right)^{-1}\left(D^{T_1} \times D^{T_2}\right)C^{TT'} = \left(C^{TT'}\right)^{-1}\left(D^{T_2} \times D^{T_1}\right)C^{TT'}\\
&\qquad\qquad = D^B \oplus D^E \oplus D^{T_1} \oplus D^{T_2},
\end{aligned}
\tag{A4.9}
$$

$$
C^{ET} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}
-1 & 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & 0\\
0 & -1 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0\\
0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0\\
\sqrt{3} & 0 & 0 & -1 & 0 & 0\\
0 & -\sqrt{3} & 0 & 0 & -1 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2
\end{pmatrix}
$$

$$
C^{TT} = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}
\sqrt{2} & -1 & \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \sqrt{3}\\
0 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & 0 & \sqrt{3}\\
\sqrt{2} & -1 & -\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0\\
0 & 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0\\
\sqrt{2} & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{pmatrix}
$$

$$
C^{TT'} = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}
\sqrt{2} & \sqrt{3} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \sqrt{3}\\
0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & -\sqrt{3}\\
\sqrt{2} & -\sqrt{3} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0\\
0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & 0\\
\sqrt{2} & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{pmatrix}
$$

五、I 群的克莱布施-戈登系数

I 群有一个一维, 两个三维, 一个四维和一个五维不等价不可约表示, 特征标表由表 3.14 给出. 采用附录 6 给出的表象, 生成元 T_0 的表示矩阵是对角矩阵, 对角元为 η^μ, $\eta = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi/5}$, $\mu =$ 整数 mod 5. 用这幂次 μ 标记各表示的行 (列)

$$\begin{aligned} &D^A: \quad \mu = 0, \qquad D^{T_1}: \quad \mu = 1,\ 0,\ \overline{1}, \qquad D^{T_2}: \quad \mu = 2,\ 0,\ \overline{2}, \\ &D^G: \quad \mu = 2,\ 1,\ \overline{1},\ \overline{2}, \qquad D^H: \quad \mu = 2,\ 1,\ 0,\ \overline{1},\ \overline{2} \end{aligned} \tag{A4.10}$$

其中, $\overline{\mu} = -\mu$. 采用类似式 (3.93) 的方式列出克莱布施 - 戈登系数. 因为表示直乘时这幂次是相加的关系, 所以式 (3.93) 可修改为

$$\Phi^J_{Mr}(1,2) = (N_{JMr})^{-1/2} \sum_\mu C_{\mu,JMr} \Psi^{jk}_{\mu(M-\mu)}(1,2) \tag{A4.11}$$

对给定的 J, M, r 和 μ, 只需用表列出不为零的系数 N 和 C. 当 D^J 不是重表示时, 指标 r 可以省略. 表中把 D^j 简记为 j.

表 A4.1

$T_1 \times T_1 = A \oplus T_1 \oplus H$						$T_2 \times T_2 = A \oplus T_2 \oplus H$					
J	M	N	μ: 1	0	$\overline{1}$	J	M	N	μ: 2	0	$\overline{2}$
A	0	3	1	−1	1	A	0	3	1	1	1
T_1	1	2	1	−1		T_2	2	2	1	−1	
	0	2	1		−1		0	2	−1		1
	$\overline{1}$	2		1	−1		$\overline{2}$	2		1	−1
H	2	1	1			H	2	2	1	1	
	1	2	1	1			1	1			1
	0	6	1	2	1		0	6	1	−2	1
	$\overline{1}$	2		1	1		$\overline{1}$	1	−1		
	$\overline{2}$	1			1		$\overline{2}$	2		1	1

表 A4.2

$T_1 \times T_2 = G \oplus H$											
J	M	N	μ: 1	0	$\overline{1}$	J	M	N	μ: 2	0	$\overline{2}$
G	2	3		$\sqrt{2}$	−1	H	2	3	0	1	$\sqrt{2}$
	1	3	$\sqrt{2}$		−1		1	3	−1		$-\sqrt{2}$
	$\overline{1}$	3	1		$-\sqrt{2}$		0	1		1	
	$\overline{2}$	3	1	$\sqrt{2}$			$\overline{1}$	3	$-\sqrt{2}$		−1
							$\overline{2}$	3	$-\sqrt{2}$	1	

表 A4.3

$T_1\times G=T_2\oplus G\oplus H$						$T_2\times G=T_1\oplus G\oplus H$					
			μ						μ		
J	M	N	1	0	$\bar{1}$	J	M	N	2	0	$\bar{2}$
	2	4	1	$\sqrt{2}$	-1		1	4	1	$\sqrt{2}$	1
T_2	0	2	1		-1	T_1	0	2	1		1
	$\bar{2}$	4	1	$\sqrt{2}$	-1		$\bar{1}$	4	-1	$-\sqrt{2}$	-1
	2	3	$\sqrt{2}$	-1			2	3		1	$\sqrt{2}$
G	1	3		1	$-\sqrt{2}$	G	1	3		1	$-\sqrt{2}$
	$\bar{1}$	3	$-\sqrt{2}$	-1			$\bar{1}$	3	$\sqrt{2}$	-1	
	$\bar{2}$	3		1	$\sqrt{2}$		$\bar{2}$	3	$-\sqrt{2}$	-1	
	2	12	1	$\sqrt{2}$	3		2	3		$\sqrt{2}$	-1
	1	3		$-\sqrt{2}$	-1		1	12	-3	$\sqrt{2}$	1
H	0	2	1		1	H	0	2	1		-1
	$\bar{1}$	3	1	$-\sqrt{2}$			$\bar{1}$	12	1	$\sqrt{2}$	-3
	$\bar{2}$	12	3	$-\sqrt{2}$	1		$\bar{2}$	3	1	$-\sqrt{2}$	

表 A4.4

$T_1\times H=T_1\oplus T_2\oplus G\oplus H$						$T_2\times H=T_1\oplus T_2\oplus G\oplus H$					
			μ						μ		
J	M	N	1	0	$\bar{1}$	J	M	N	2	0	$\bar{2}$
	1	10	1	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{6}$		1	5	$-\sqrt{2}$	-1	$-\sqrt{2}$
T_1	0	10	$\sqrt{3}$	-2	$\sqrt{3}$	T_1	0	5	1	$\sqrt{3}$	1
	$\bar{1}$	10	$\sqrt{6}$	$-\sqrt{3}$	1		$\bar{1}$	5	$\sqrt{2}$	-1	$-\sqrt{2}$
	2	5	$\sqrt{2}$	1	$\sqrt{2}$		2	10	1	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{6}$
T_2	0	5	1	$\sqrt{3}$	1	T_2	0	10	$\sqrt{3}$	-2	$\sqrt{3}$
	$\bar{2}$	5	$-\sqrt{2}$	1	$\sqrt{2}$		$\bar{2}$	10	$\sqrt{6}$	$\sqrt{3}$	1
	2	15	-2	$-\sqrt{2}$	3		2	15	$\sqrt{6}$	$-2\sqrt{2}$	-1
G	1	15	$\sqrt{6}$	$2\sqrt{2}$	1	G	1	15	3	$-\sqrt{2}$	-2
	$\bar{1}$	15	1	$2\sqrt{2}$	$\sqrt{6}$		$\bar{1}$	15	2	$-\sqrt{2}$	3
	$\bar{2}$	15	3	$\sqrt{2}$	2		$\bar{2}$	15	-1	$2\sqrt{2}$	$-\sqrt{6}$
	2	3	1	$-\sqrt{2}$			2	6	$\sqrt{3}$	1	$\sqrt{2}$
	1	6	$\sqrt{3}$	-1	$-\sqrt{2}$		1	3		$-\sqrt{2}$	1
H	0	2	1		-1	H	0	2	-1		1
	$\bar{1}$	6	$\sqrt{2}$	1	$-\sqrt{3}$		$\bar{1}$	3	1	$\sqrt{2}$	
	$\bar{2}$	3		$\sqrt{2}$	-1		$\bar{2}$	6	$\sqrt{2}$	-1	$-\sqrt{3}$

表 A4.5

$G\times G=A\oplus T_1\oplus T_2\oplus G\oplus H$													
			μ							μ			
J	M	N	2	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$	J	M	N	2	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$
A	0	4	1	1	1	1		2	2			-1	1
	1	2	1		-1		T_2	0	4	-1	-1	1	1
T_1	0	4	-1	1	-1	1		$\bar{2}$	2	-1	1		
	$\bar{1}$	2		-1		1		2	6		2	1	1
	2	3		1	-1	-1		1	6	1		1	2
G	1	3	1		1	-1	H	0	4	1	-1	-1	1
	$\bar{1}$	3	-1	1		1		$\bar{1}$	6	-2	-1		-1
	$\bar{2}$	3	-1	-1	1			$\bar{2}$	6	1	1	2	

表 A4.6

$G \times H = T_1 \oplus T_2 \oplus G \oplus H \oplus H$

J	M	N	μ				J	M	N	μ			
			2	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$				2	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$
T_1	1	20	2	$\sqrt{6}$	1	3	$H(1)$	2	3		-1	-1	-1
	0	10	-1	-2	-2	1		1	12	-2	$\sqrt{6}$	1	-1
	$\bar{1}$	20	3	1	$\sqrt{6}$	-2		0	2	1			1
T_2	2	20	$\sqrt{6}$	-3	2	1		$\bar{1}$	12	1	-1	$-\sqrt{6}$	-2
	0	10	-2	1	1	2		$\bar{2}$	3	1	-1	1	
	$\bar{2}$	20	1	-2	-3	$-\sqrt{6}$	$H(2)$	2	12	$-\sqrt{6}$	-1	2	-1
G	2	15	$\sqrt{3}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	$-2\sqrt{2}$		1	3	1		1	-1
	1	15	$-\sqrt{2}$	$-\sqrt{3}$	$2\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$		0	2		1	-1	
	$\bar{1}$	15	$\sqrt{2}$	$2\sqrt{2}$	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{2}$		$\bar{1}$	3	1	-1		1
	$\bar{2}$	15	$2\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{3}$		$\bar{2}$	12	1	2	1	$-\sqrt{6}$

表 A4.7

$H \times H = A \oplus T_1 \oplus T_2 \oplus G \oplus G \oplus H \oplus H$

J	M	N	μ				
			2	1	0	$\bar{1}$	$\bar{2}$
A	0	5	1	-1	1	-1	1
T_1	1	10	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{2}$	
	0	10	2	-1		1	-2
	$\bar{1}$	10		$\sqrt{2}$	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{2}$
T_2	2	20	$\sqrt{6}$		$-\sqrt{6}$	2	-2
	0	10	1	2		-2	-1
	$\bar{2}$	20	-2	2	$\sqrt{6}$		$-\sqrt{6}$
$G(1)$	2	10	$-\sqrt{2}$		$\sqrt{2}$	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$
	1	10	$\sqrt{3}$	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	$-\sqrt{3}$	
	$\bar{1}$	10		$\sqrt{3}$	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	$-\sqrt{3}$
	$\bar{2}$	10	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{2}$		$-\sqrt{2}$
$G(2)$	2	30	$\sqrt{6}$	4	$\sqrt{6}$	-1	-1
	1	30	1	$\sqrt{6}$	$\sqrt{6}$	1	-4
	$\bar{1}$	30	-4	-1	$-\sqrt{6}$	$-\sqrt{6}$	-1
	$\bar{2}$	30	1	1	$\sqrt{6}$	4	$\sqrt{6}$
$H(1)$	2	7	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{2}$		
	1	14	$\sqrt{6}$	-1	-1	$\sqrt{6}$	
	0	14	2	1	-2	1	2
	$\bar{1}$	14		$\sqrt{6}$	-1	-1	$\sqrt{6}$
	$\bar{2}$	7			$\sqrt{2}$	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{2}$
$H(2)$	2	210	$\sqrt{3}$	$2\sqrt{2}$	$\sqrt{3}$	$7\sqrt{2}$	$7\sqrt{2}$
	1	105	-2	$-2\sqrt{6}$	$-2\sqrt{6}$	-2	-7
	0	70	1	4	6	4	1
	$\bar{1}$	105	7	-2	$-2\sqrt{6}$	$-2\sqrt{6}$	-2
	$\bar{2}$	210	$-7\sqrt{2}$	$-7\sqrt{2}$	$\sqrt{3}$	$2\sqrt{2}$	$\sqrt{3}$

附录 5　O 群群空间的不可约基

2.5 节介绍过 O 群的基本性质. O 群是立方体的固有对称变换群, 包含 24 个元素, 5 个自逆类, 乘法表由表 2.9, 2.10 和 2.11 给出. O 群有两个一维, 一个二维和两个三维不等价不可约表示, 特征标表由表 3.9 给出. 生成元取沿 z 轴的四次轴转动 T_z 和沿 $(e_1+e_2+e_3)/\sqrt{3}$ 方向的三次轴转动 R_1. O 群有不变子群 D_2 和 T, 关于 D_2 子群的商群同构于 D_3 群. 商群的表示给出 O 群前三个不等价不可约表示. 在三维表示中, D^{T_1} 是子群 T 三维表示的扩充, $D^{T_2}=D^B\times D^{T_1}$. 表示矩阵由式 (3.60)~(3.62) 给出, 在这表象中生成元 T_z^2 的表示矩阵是对角化的.

用投影算符方法计算 O 群群空间的不可约基. 分别做相似变换 X 和 Y 使生成元 R_1 的表示矩阵对角化,

$$
\begin{aligned}
&Y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ \mathrm{i} & -\mathrm{i}\end{pmatrix}, \qquad Y^{-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & -\mathrm{i}\\ 1 & \mathrm{i}\end{pmatrix},\\
&\overline{D}^E(R_1)=\begin{pmatrix}\omega & 0\\ 0 & \omega^2\end{pmatrix}, \qquad \overline{D}^E(T_z)=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{A5.1}
$$

$$
\begin{aligned}
&X=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1 & \omega^2 & \omega\\ 1 & \omega & \omega^2\\ 1 & 1 & 1\end{pmatrix}, \qquad X^{-1}=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1 & 1 & 1\\ \omega & \omega^2 & 1\\ \omega^2 & \omega & 1\end{pmatrix}\\
&\overline{D}^{T_1}(R_1)=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \omega & 0\\ 0 & 0 & \omega^2\end{pmatrix}, \qquad \overline{D}^{T_1}(T_z)=\frac{1}{3}\begin{pmatrix}1 & -2\omega & -2\omega^2\\ -2\omega & -2\omega^2 & 1\\ -2\omega^2 & 1 & -2\omega\end{pmatrix}\\
&\overline{D}^{T_2}(R_1)=\overline{D}^{T_1}(R_1), \qquad \overline{D}^{T_2}(T_z)=-\overline{D}^{T_1}(T_z)
\end{aligned}
\tag{A5.2}
$$

其中, $\omega=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi/3}$. R_1 的本征值是 ω^ρ, $\rho=0,1,2 \bmod 3$. 用这幂次 ρ 来标记不可约表示的行 (列) 指标, 群代数的不可约基为

$$
\phi_{00}^A, \qquad \phi_{00}^B, \qquad \phi_{\alpha\beta}^E, \qquad \phi_{\rho\lambda}^T, \qquad \alpha,\beta=1,2, \qquad \rho,\lambda=0,1,2 \tag{A5.3}
$$

与 T 群情况相同, 先用投影算符 P^ρ 计算左乘和右乘 R_1 的共同本征矢量 $\Phi_{\rho\lambda}^{(r)}$

$$
\begin{aligned}
&R_1\Phi_{\rho\lambda}^{(r)}=\omega^\rho\Phi_{\rho\lambda}^{(r)}, \qquad \Phi_{\rho\lambda}^{(r)}R_1=\omega^\lambda\Phi_{\rho\lambda}^{(r)},\\
&P^\rho=\left\{E+\omega^{-\rho}R_1+\omega^\rho R_1^2\right\}/3, \qquad \Phi_{\rho\lambda}^{(r)}=9P^\rho RP^\lambda
\end{aligned}
\tag{A5.4}
$$

其中, 因子 9 是为了使公式简洁. 取 R 为 E 和 T_z^2 的结果是与式 (3.129) 和 (3.130) 相同的, 再取 R 为 T_z 和 S_2, 利用乘法表 2.9 ~ 2.11, 通过类似的计算, 得

$$\begin{aligned}
\Phi_{\rho\lambda}^{(1)} &= 9P^{\rho}EP^{\lambda} = 3\delta_{\rho\lambda}\left\{E + R_1\omega^{-\rho} + R_1^2\omega^{\rho}\right\}, \\
\Phi_{\rho\lambda}^{(2)} &= 9P^{\rho}T_z^2P^{\lambda} = \left\{T_z^2 + \omega^{-\lambda}R_2 + \omega^{\lambda}R_4^2\right\} + \omega^{\lambda-\rho}\left\{T_x^2 + \omega^{-\lambda}R_4 + \omega^{\lambda}R_3^2\right\} \\
&\quad + \omega^{\rho-\lambda}\left\{T_y^2 + \omega^{-\lambda}R_3 + \omega^{\lambda}R_2^2\right\}, \\
\Phi_{\rho\lambda}^{(3)} &= 9P^{\rho}T_zP^{\lambda} = T_z + \omega^{-\lambda}S_3 + \omega^{\lambda}T_y^3 + \omega^{\lambda-\rho}\left\{T_x + \omega^{-\lambda}S_5 + \omega^{\lambda}T_z^3\right\} \\
&\quad + \omega^{\rho-\lambda}\left\{T_y + \omega^{-\lambda}S_1 + \omega^{\lambda}T_x^3\right\}, \\
\Phi_{\rho\lambda}^{(4)} &= 9P\rho S_2P^{\lambda} = 3\delta_{\rho(-\lambda)}\left\{S_2 + \omega^{\rho}S_4 + \omega^{-\rho}S_6\right\}
\end{aligned} \tag{A5.5}$$

其中, $\delta_{\rho(-\lambda)}$ 在 $\rho+\lambda$ 等于 3 的倍数时等于 1, 其余为零. 在这四组函数基展开式中已出现群 O 的全部元素, 再把投影算符作用在其他群元素上, 不会产生独立的新函数基.

其次, 为了区分属不等价不可约表示的函数基, 选择类算符 $W = T_x + T_x^3 + T_y + T_y^3 + T_z + T_z^3$, 它在各不可约表示 D^A, D^B, D^E, D^{T_1} 和 D^{T_2} 中的取值分别为 6, −6, 0, 2 和 −2. 现在对确定的下标 ρ 和 λ, 计算 W 在函数基 $\Phi_{\rho\lambda}^{(r)}$ 中的矩阵元和本征矢量. 由于函数基的完备性, 我们只需要列出 E, T_z^2, T_z 和 S_2 的项. 常用的元素乘法公式可以先从乘法表中查出备用

$$\begin{aligned}
&T_xT_x^3 = T_x^3T_x = T_yT_y^3 = T_y^3T_y = T_zT_z^3 = T_z^3T_z = E, \\
&T_zE = T_z^3T_z^2 = T_xR_2^2 = T_x^3R_4^2 = T_yR_3 = T_y^3R_1 = T_z, \\
&T_zT_z = T_z^3T_z^3 = T_xS_3 = T_x^3S_4 = T_yS_6 = T_y^3S_5 = T_z^2, \\
&T_zT_y^2 = T_z^3T_x^2 = T_xR_4^2 = T_x^3R_2^2 = T_yR_4 = T_y^3R_2 = S_2
\end{aligned} \tag{A5.6}$$

则

$$\begin{aligned}
W\Phi_{\rho\rho}^{(1)} &= 3T_z\left\{1+\omega^{-\rho}\right\} + \cdots = 3\omega^{\rho}\left(3\delta_{\rho0}-1\right)\Phi_{\rho\rho}^{(3)}, \\
W\Phi_{\rho\lambda}^{(2)} &= T_z\left\{1+\omega^{\rho}+\omega^{\lambda}+\omega^{\rho+\lambda}\right\} \\
&\quad + S_2\left\{\omega^{\lambda-\rho}+\omega^{\rho-\lambda}+\omega^{-\rho}+\omega^{-\lambda}+\omega^{\rho}+\omega^{\lambda}\right\} + \cdots \\
&= \omega^{-\rho-\lambda}\left(1+9\delta_{\rho0}\delta_{\lambda0}-3\delta_{\rho0}-3\delta_{\lambda0}\right)\Phi_{\rho\lambda}^{(3)} + \delta_{\rho(-\lambda)}\left(3\delta_{\rho0}-1\right)\Phi_{\rho\lambda}^{(4)}, \\
W\Phi_{\rho\lambda}^{(3)} &= E\left\{\omega^{\rho}+\omega^{\lambda-\rho}+\omega^{\lambda}+\omega^{\rho-\lambda}+\omega^{-\lambda-\rho}+1\right\} \\
&\quad + T_z^2\left\{1+\omega^{-\lambda-\rho}+\omega^{-\lambda}+\omega^{-\rho}\right\} + \cdots \\
&= \delta_{\rho\lambda}\left(3\delta_{\rho0}-1\right)\omega^{-\rho}\Phi_{\rho\rho}^{(1)} + \omega^{\rho+\lambda}\left(1+9\delta_{\rho0}\delta_{\lambda0}-3\delta_{\rho0}-3\delta_{\lambda0}\right)\Phi_{\rho\lambda}^{(2)}, \\
W\Phi_{\rho\lambda}^{(4)} &= 3\delta_{\rho(-\lambda)}T_z^2\left\{\omega^{\rho}+\omega^{-\rho}\right\} + \cdots = 3\delta_{\rho(-\lambda)}\left(3\delta_{\rho0}-1\right)\Phi_{\rho\lambda}^{(2)}
\end{aligned} \tag{A5.7}$$

当 $\rho=\lambda=0$ 时, 有四个基 $\Phi_{00}^{(1)}$, $\Phi_{00}^{(2)}$, $\Phi_{00}^{(3)}$ 和 $\Phi_{00}^{(4)}$, W 在这组基中的矩阵形式

及其本征矢量为

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 6 \\ 6 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ -3 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

本征值分别为 6, −6, 2 和 −2, 相应的本征矢量分属表示 D^A, D^B, D^{T_1} 和 D^{T_2}

$$\begin{aligned}
\phi_{00}^{A} &= c_A \left\{ \Phi_{00}^{(1)} + 3\Phi_{00}^{(2)} + 3\Phi_{00}^{(3)} + \Phi_{00}^{(4)} \right\} \\
&= 3c_A \left\{ E + R_1 + R_1^2 + T_x^2 + T_y^2 + T_z^2 + R_2 + R_2^2 \right. \\
&\quad + R_3 + R_3^2 + R_4 + R_4^2 + T_x + T_x^3 + T_y + T_y^3 \\
&\quad \left. + T_z + T_z^3 + S_1 + S_3 + S_5 + S_2 + S_4 + S_6 \right\}, \\
\phi_{00}^{B} &= c_B \left\{ \Phi_{00}^{(1)} + 3\Phi_{00}^{(2)} - 3\Phi_{00}^{(3)} - \Phi_{00}^{(4)} \right\} \\
&= 3c_B \left\{ E + R_1 + R_1^2 + T_x^2 + T_y^2 + T_z^2 + R_2 + R_2^2 \right. \\
&\quad + R_3 + R_3^2 + R_4 + R_4^2 - T_x - T_x^3 - T_y - T_y^3 \\
&\quad \left. - T_z - T_z^3 - S_1 - S_3 - S_5 - S_2 - S_4 - S_6 \right\}, \\
\phi_{00}^{T_1} &= b_{00} \left\{ \Phi_{00}^{(1)} - \Phi_{00}^{(2)} + \Phi_{00}^{(3)} - \Phi_{00}^{(4)} \right\} \\
&= b_{00} \left\{ 3E + 3R_1 + 3R_1^2 - T_x^2 - T_y^2 - T_z^2 - R_2 - R_2^2 \right. \\
&\quad - R_3 - R_3^2 - R_4 - R_4^2 + T_x + T_x^3 + T_y + T_y^3 \\
&\quad \left. + T_z + T_z^3 + S_1 + S_3 + S_5 - 3S_2 - 3S_4 - 3S_6 \right\}, \\
\phi_{00}^{T_2} &= c_{00} \left\{ \Phi_{00}^{(1)} - \Phi_{00}^{(2)} - \Phi_{00}^{(3)} + \Phi_{00}^{(4)} \right\} \\
&= c_{00} \left\{ 3E + 3R_1 + 3R_1^2 - T_x^2 - T_y^2 - T_z^2 - R_2 - R_2^2 \right. \\
&\quad - R_3 - R_3^2 - R_4 - R_4^2 - T_x - T_x^3 - T_y - T_y^3 \\
&\quad \left. - T_z - T_z^3 - S_1 - S_3 - S_5 + 3S_2 + 3S_4 + 3S_6 \right\}
\end{aligned} \tag{A5.8}$$

每个波函数前面都可乘一任意常数. 对一维表示, 这常数就是归一化因子, 取为 $c_A = c_B = \sqrt{1/216}$, 但对二维或三维表示, 每一个不可约表示只有一个常数可以选择, 可取 $b_{00} = c_{00} = \sqrt{1/72}$.

当 $\rho = \lambda \neq 0$ 时, 有三个基 $\Phi_{\rho\rho}^{(1)}$, $\Phi_{\rho\rho}^{(2)}$ 和 $\Phi_{\rho\rho}^{(3)}$, W 在这组基中的矩阵形式及其本征矢量为

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -\omega^{-\rho} \\ 0 & 0 & \omega^{-\rho} \\ -3\omega^{\rho} & \omega^{\rho} & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -2\omega^{\rho} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2\omega^{\rho} \end{pmatrix}$$

本征值为 0, 2 和 −2, 相应的本征矢量分属表示 D^E, D^{T_1} 和 D^{T_2}

$$\begin{aligned}
\phi^E_{\rho\rho} &= a_{\rho\rho}\left\{\Phi^{(1)}_{\rho\rho}+3\Phi^{(2)}_{\rho\rho}\right\} \\
&= 3a_{\rho\rho}\left\{E+T_x^2+T_y^2+T_z^2+\omega^{-\rho}\left(R_1+R_2+R_3+R_4\right)\right. \\
&\quad \left.+\omega^{\rho}\left(R_1^2+R_2^2+R_3^2+R_4^2\right)\right\}, \\
\phi^{T_1}_{\rho\rho} &= b_{\rho\rho}\left\{\Phi^{(1)}_{\rho\rho}-\Phi^{(2)}_{\rho\rho}-2\omega^{\rho}\Phi^{(3)}_{\rho\rho}\right\} \\
&= b_{\rho\rho}\left\{3E-T_x^2-T_y^2-T_z^2-2S_1-2S_3-2S_5\right. \\
&\quad +\omega^{-\rho}\left(3R_1-R_2-R_3-R_4-2T_x^3-2T_y^3-2T_z^3\right) \\
&\quad \left.+\omega^{\rho}\left(3R_1^2-R_2^2-R_3^2-R_4^2-2T_x-2T_y-2T_z\right)\right\}, \\
\phi^{T_2}_{\rho\rho} &= c_{\rho\rho}\left\{\Phi^{(1)}_{\rho\rho}-\Phi^{(2)}_{\rho\rho}+2\omega^{\rho}\Phi^{(3)}_{\rho\rho}\right\} \\
&= c_{\rho\rho}\left\{3E-T_x^2-T_y^2-T_z^2+2S_1+2S_3+2S_5\right. \\
&\quad +\omega^{-\rho}\left(3R_1-R_2-R_3-R_4+2T_x^3+2T_y^3+2T_z^3\right) \\
&\quad \left.+\omega^{\rho}\left(3R_1^2-R_2^2-R_3^2-R_4^2+2T_x+2T_y+2T_z\right)\right\}
\end{aligned} \tag{A5.9}$$

可取 $a_{11}=\sqrt{1/108}$.

当 $\rho+\lambda=3$ 时, 有三个基 $\Phi^{(2)}_{\rho\lambda}$, $\Phi^{(3)}_{\rho\lambda}$ 和 $\Phi^{(4)}_{\rho\lambda}$, W 在这组基中的矩阵形式及其本征矢量为

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & -3 \\ 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

本征值分别为 0, 2 和 −2, 相应的本征矢量分属表示 D^E, D^{T_1} 和 D^{T_2}

$$\begin{aligned}
\phi^E_{\rho\lambda} &= a_{\rho\lambda}\left\{3\Phi^{(3)}_{\rho\lambda}+\Phi^{(4)}_{\rho\lambda}\right\} \\
&= 3a_{\rho\lambda}\left\{T_z+T_z^3+S_1+S_2+\omega^{-\rho}\left(T_y+T_y^3+S_5+S_6\right)\right. \\
&\quad \left.+\omega^{\rho}\left(T_x+T_x^3+S_3+S_4\right)\right\}, \\
\phi^{T_1}_{\rho\lambda} &= b_{\rho\lambda}\left\{2\Phi^{(2)}_{\rho\lambda}+\Phi^{(3)}_{\rho\lambda}-\Phi^{(4)}_{\rho\lambda}\right\} \\
&= b_{\rho\lambda}\left\{2T_z^2+2R_3+2R_3^2+T_z+T_z^3+S_1-3S_2\right. \\
&\quad +\omega^{-\rho}\left(2T_y^2+2R_4+2R_4^2+T_y+T_y^3+S_5-3S_6\right) \\
&\quad \left.+\omega^{\rho}\left(2T_x^2+2R_2+2R_2^2+T_x+T_x^3+S_3-3S_4\right)\right\}, \\
\phi^{T_2}_{\rho\lambda} &= c_{\rho\lambda}\left\{2\Phi^{(2)}_{\rho\lambda}-\Phi^{(3)}_{\rho\lambda}+\Phi^{(4)}_{\rho\lambda}\right\} \\
&= c_{\rho\lambda}\left\{2T_z^2+2R_3+2R_3^2-T_z-T_z^3-S_1+3S_2\right. \\
&\quad +\omega^{-\rho}\left(2T_y^2+2R_4+2R_4^2-T_y-T_y^3-S_5+3S_6\right) \\
&\quad \left.+\omega^{\rho}\left(2T_x^2+2R_2+2R_2^2-T_x-T_x^3-S_3+3S_4\right)\right\}
\end{aligned} \tag{A5.10}$$

当 $\rho=0$ 和 $\lambda\neq 0$ 时, 有两个基 $\Phi_{0\lambda}^{(2)}$ 和 $\Phi_{0\lambda}^{(3)}$, W 在这组基中的矩阵形式及其本征矢量为

$$\begin{pmatrix} 0 & -2\omega^{\lambda} \\ -2\omega^{-\lambda} & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ -\omega^{-\lambda} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ \omega^{-\lambda} \end{pmatrix}$$

本征值分别为 2 和 -2, 相应的本征矢量分属表示 D^{T_1} 和 D^{T_2}

$$\begin{aligned} \phi_{0\lambda}^{T_1} = b_{0\lambda}\left\{\Phi_{0\lambda}^{(2)} - \omega^{-\lambda}\Phi_{0\lambda}^{(3)}\right\} &= b_{0\lambda}\left\{T_z^2 + R_4 + R_2^2 - T_x - T_y^3 - S_1\right. \\ &\quad +\omega^{-\lambda}\left(T_y^2 + R_2 + R_3^2 - T_z - T_x^3 - S_5\right) \\ &\quad \left.+\omega^{\lambda}\left(T_x^2 + R_3 + R_4^2 - T_y - T_z^3 - S_3\right)\right\}, \\ \phi_{0\lambda}^{T_2} = c_{0\lambda}\left\{\Phi_{0\lambda}^{(2)} + \omega^{-\lambda}\Phi_{0\lambda}^{(3)}\right\} &= c_{0\lambda}\left\{T_z^2 + R_4 + R_2^2 + T_x + T_y^3 + S_1\right. \\ &\quad +\omega^{-\lambda}\left(T_y^2 + R_2 + R_3^2 + T_z + T_x^3 + S_5\right) \\ &\quad \left.+\omega^{\lambda}\left(T_x^2 + R_3 + R_4^2 + T_y + T_z^3 + S_3\right)\right\} \end{aligned} \tag{A5.11}$$

当 $\lambda=0$ 和 $\rho\neq 0$ 时, 有两个基 $\Phi_{\rho 0}^{(2)}$ 和 $\Phi_{\rho 0}^{(3)}$, W 在这组基中的矩阵形式及其本征矢量为

$$\begin{pmatrix} 0 & -2\omega^{\rho} \\ -2\omega^{-\rho} & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ -\omega^{-\rho} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ \omega^{-\rho} \end{pmatrix}$$

本征值分别为 2 和 -2, 相应的本征矢量分属表示 D^{T_1} 和 D^{T_2}

$$\begin{aligned} \phi_{\rho 0}^{T_1} = b_{\rho 0}\left\{\Phi_{\rho 0}^{(2)} - \omega^{-\rho}\Phi_{\rho 0}^{(3)}\right\} &= b_{\rho 0}\left\{T_z^2 + R_2 + R_4^2 - T_y - S_1 - T_x^3\right. \\ &\quad +\omega^{-\rho}\left(T_x^2 + R_4 + R_3^2 - T_z - S_3 - T_y^3\right) \\ &\quad \left.+\omega^{\rho}\left(T_y^2 + R_3 + R_2^2 - T_x - S_5 - T_z^3\right)\right\}, \\ \phi_{\rho 0}^{T_2} = c_{\rho 0}\left\{\Phi_{\rho 0}^{(2)} + \omega^{-\rho}\Phi_{\rho 0}^{(3)}\right\} &= c_{\rho 0}\left\{T_z^2 + R_2 + R_4^2 + T_y + S_1 + T_x^3\right. \\ &\quad +\omega^{-\rho}\left(T_x^2 + R_4 + R_3^2 + T_z + S_3 + T_y^3\right) \\ &\quad \left.+\omega^{\rho}\left(T_y^2 + R_3 + R_2^2 + T_x + S_5 + T_z^3\right)\right\} \end{aligned} \tag{A5.12}$$

现在根据不可约基的定义计算这些不可约基的未定系数

$$T_z\phi_{\rho\lambda}^{j} = \sum_{\tau} \phi_{\tau\lambda}^{j}\overline{D}_{\tau\rho}^{j}(T_z), \qquad \phi_{\rho\lambda}^{j}T_z = \sum_{\tau} \overline{D}_{\lambda\tau}^{j}(T_z)\phi_{\rho\tau}^{j} \tag{A5.13}$$

对二维表示 $\overline{D}^{E}$, 计算中只需列出 E 和 T_z 的项. 由式 (A5.1)

$$T_z\phi_{11}^{E} = \sqrt{1/12}\left\{T_z + \cdots\right\} = \phi_{21}^{E}$$

定出 $a_{21}=\sqrt{1/108}$. 再用式 (A5.1) 得

$$\begin{aligned} \phi_{11}^{E}T_z &= \sqrt{1/12}\left\{T_z + \cdots\right\} = \phi_{12}^{E}, \\ \phi_{21}^{E}T_z &= \sqrt{1/12}\left\{E + \cdots\right\} = \phi_{22}^{E} \end{aligned}$$

定出 $a_{12}=a_{22}=\sqrt{1/108}$. 列出表示 D^E 的不可约基

$$\begin{aligned}
\phi^E_{11} &= \sqrt{1/12}\left\{E+T_x^2+T_y^2+T_z^2+\omega^2\left(R_1+R_2+R_3+R_4\right)\right.\\
&\quad\left.+\omega\left(R_1^2+R_2^2+R_3^2+R_4^2\right)\right\},\\
\phi^E_{21} &= \sqrt{1/12}\left\{T_z+T_z^3+S_1+S_2+\omega\left(T_y+T_y^3+S_5+S_6\right)\right.\\
&\quad\left.+\omega^2\left(T_x+T_x^3+S_3+S_4\right)\right\},\\
\phi^E_{12} &= \sqrt{1/12}\left\{T_z+T_z^3+S_1+S_2+\omega^2\left(T_y+T_y^3+S_5+S_6\right)\right.\\
&\quad\left.+\omega\left(T_x+T_x^3+S_3+S_4\right)\right\},\\
\phi^E_{22} &= \sqrt{1/12}\left\{E+T_x^2+T_y^2+T_z^2+\omega\left(R_1+R_2+R_3+R_4\right)\right.\\
&\quad\left.+\omega^2\left(R_1^2+R_2^2+R_3^2+R_4^2\right)\right\}
\end{aligned}\tag{A5.14}$$

如果取式 (3.77) 的表象, 则需做 Y^{-1} 变换

$$\psi^E_{\mu\nu}=\sum_{\alpha\beta}Y_{\nu\beta}\phi^E_{\alpha\beta}\left(Y^{-1}\right)_{\alpha\mu}=\sum_{\alpha\beta}Y^*_{\mu\alpha}\phi^E_{\alpha\beta}\left(Y^{-1}\right)^*_{\beta\nu}\tag{A5.15}$$

计算结果为

$$\begin{aligned}
\psi^E_{11} &= \sqrt{1/48}\left\{2\left(E+T_x^2+T_y^2+T_z^2\right)+2\left(T_z+T_z^3+S_1+S_2\right)\right.\\
&\quad-\left(R_1+R_2+R_3+R_4+R_1^2+R_2^2+R_3^2+R_4^2\right)\\
&\quad\left.-\left(T_y+T_y^3+S_5+S_6+T_x+T_x^3+S_3+S_4\right)\right\},\\
\psi^E_{21} &= (1/4)\left\{\left(R_1+R_2+R_3+R_4\right)-\left(R_1^2+R_2^2+R_3^2+R_4^2\right)\right.\\
&\quad\left.+\left(T_y+T_y^3+S_5+S_6\right)-\left(T_x+T_x^3+S_3+S_4\right)\right\},\\
\psi^E_{12} &= (1/4)\left\{-\left(R_1+R_2+R_3+R_4\right)+\left(R_1^2+R_2^2+R_3^2+R_4^2\right)\right.\\
&\quad\left.+\left(T_y+T_y^3+S_5+S_6\right)-\left(T_x+T_x^3+S_3+S_4\right)\right\},\\
\psi^E_{22} &= \sqrt{1/48}\left\{2\left(E+T_x^2+T_y^2+T_z^2\right)-2\left(T_z+T_z^3+S_1+S_2\right)\right.\\
&\quad-\left(R_1+R_2+R_3+R_4+R_1^2+R_2^2+R_3^2+R_4^2\right)\\
&\quad\left.+\left(T_y+T_y^3+S_5+S_6+T_x+T_x^3+S_3+S_4\right)\right\}
\end{aligned}\tag{A5.16}$$

对三维表示 D^{T_1}, 计算中只需列出 E, T_z, T_z^2 和 T_z^3 的项. 由式 (A5.2) 得

$$\begin{aligned}
&T_z\phi^{T_1}_{00}=\sqrt{1/72}\left\{E+3T_z+T_z^2-T_z^3+\cdots\right\}=\left\{\phi^{T_1}_{00}-2\omega\phi^{T_1}_{10}-2\omega^2\phi^{T_1}_{20}\right\}/3,\\
&\phi^{T_1}_{00}=\sqrt{1/72}\left\{3E+T_z-T_z^2+T_z^3+\cdots\right\},\\
&\phi^{T_1}_{10}=b_{10}\left\{-\omega^2T_z+T_z^2-\omega T_z^3+\cdots\right\},\qquad \phi^{T_1}_{20}=b_{20}\left\{-\omega T_z+T_z^2-\omega^2T_z^3+\cdots\right\}
\end{aligned}$$

定出 $b_{10}=b_{20}=\sqrt{1/18}$. 再由式 (A5.2) 得

$$\begin{aligned}
&\phi^{T_1}_{00}T_z=\sqrt{1/72}\left\{E+3T_z+T_z^2-T_z^3+\cdots\right\}=\left\{\phi^{T_1}_{00}-2\omega\phi^{T_1}_{01}-2\omega^2\phi^{T_1}_{02}\right\}/3,\\
&\phi^{T_1}_{01}=b_{01}\left\{-\omega^2T_z+T_z^2-\omega T_z^3+\cdots\right\},\qquad \phi^{T_1}_{02}=b_{02}\left\{-\omega T_z+T_z^2-\omega^2T_z^3+\cdots\right\},
\end{aligned}$$

$$\phi_{10}^{T_1}T_z = \sqrt{1/18}\left\{-\omega E - \omega^2 T_z^2 + T_z^3 + \cdots\right\} = \left\{\phi_{10}^{T_1} - 2\omega\phi_{11}^{T_1} - 2\omega^2\phi_{12}^{T_1}\right\}/3,$$
$$\phi_{11}^{T_1} = b_{11}\left\{3E - 2\omega T_z - T_z^2 - 2\omega^2 T_z^3\right\}, \qquad \phi_{12}^{T_1} = b_{12}\left\{T_z + 2T_z^2 + T_z^3\right\},$$
$$\phi_{20}^{T_1}T_z = \sqrt{1/18}\left\{-\omega^2 E - \omega T_z^2 + T_z^3 + \cdots\right\} = \left\{\phi_{20}^{T_1} - 2\omega\phi_{21}^{T_1} - 2\omega^2\phi_{22}^{T_1}\right\}/3,$$
$$\phi_{21}^{T_1} = b_{21}\left\{T_z + 2T_z^2 + T_z^3\right\}, \qquad \phi_{22}^{T_1} = b_{22}\left\{3E - 2\omega^2 T_z - T_z^2 - 2\omega T_z^3\right\}$$

定出 $b_{01}=b_{02}=\sqrt{1/18}$ 和 $b_{11}=b_{22}=b_{12}=b_{21}=\sqrt{1/72}$. 表示 D^{T_1} 的不可约基为

$$\begin{aligned}
\phi_{00}^{T_1} &= \sqrt{1/72}\left\{3E + 3R_1 + 3R_1^2 - T_x^2 - T_y^2 - T_z^2 - R_2 - R_2^2\right.\\
&\quad -R_3 - R_3^2 - R_4 - R_4^2 + T_x + T_x^3 + T_y + T_y^3\\
&\quad \left.+T_z + T_z^3 + S_1 + S_3 + S_5 - 3S_2 - 3S_4 - 3S_6\right\},\\
\phi_{10}^{T_1} &= \sqrt{1/18}\left\{T_z^2 + R_2 + R_4^2 - T_y - S_1 - T_x^3 + \omega^2\left(T_x^2 + R_4 + R_3^2\right.\right.\\
&\quad \left.\left.-T_z - S_3 - T_y^3\right) + \omega\left(T_y^2 + R_3 + R_2^2 - T_x - S_5 - T_z^3\right)\right\},\\
\phi_{20}^{T_1} &= \sqrt{1/18}\left\{T_z^2 + R_2 + R_4^2 - T_y - S_1 - T_x^3 + \omega\left(T_x^2 + R_4 + R_3^2\right.\right.\\
&\quad \left.\left.-T_z - S_3 - T_y^3\right) + \omega^2\left(T_y^2 + R_3 + R_2^2 - T_x - S_5 - T_z^3\right)\right\},\\
\phi_{01}^{T_1} &= \sqrt{1/18}\left\{T_z^2 + R_4 + R_2^2 - T_x - T_y^3 - S_1 + \omega^2\left(T_y^2 + R_2 + R_3^2\right.\right.\\
&\quad \left.\left.-T_z - T_x^3 - S_5\right) + \omega\left(T_x^2 + R_3 + R_4^2 - T_y - T_z^3 - S_3\right)\right\},\\
\phi_{11}^{T_1} &= \sqrt{1/72}\left\{3E - T_x^2 - T_y^2 - T_z^2 - 2S_1 - 2S_3 - 2S_5\right.\\
&\quad +\omega^2\left(3R_1 - R_2 - R_3 - R_4 - 2T_x^3 - 2T_y^3 - 2T_z^3\right)\\
&\quad \left.+\omega\left(3R_1^2 - R_2^2 - R_3^2 - R_4^2 - 2T_x - 2T_y - 2T_z\right)\right\},\\
\phi_{21}^{T_1} &= \sqrt{1/72}\left\{2T_z^2 + 2R_3 + 2R_3^2 + T_z + T_z^3 + S_1 - 3S_2\right.\\
&\quad +\omega\left(2T_y^2 + 2R_4 + 2R_4^2 + T_y + T_y^3 + S_5 - 3S_6\right)\\
&\quad \left.+\omega^2\left(2T_x^2 + 2R_2 + 2R_2^2 + T_x + T_x^3 + S_3 - 3S_4\right)\right\},\\
\phi_{02}^{T_1} &= \sqrt{1/18}\left\{T_z^2 + R_4 + R_2^2 - T_x - T_y^3 - S_1 + \omega\left(T_y^2 + R_2 + R_3^2\right.\right.\\
&\quad \left.\left.-T_z - T_x^3 - S_5\right) + \omega^2\left(T_x^2 + R_3 + R_4^2 - T_y - T_z^3 - S_3\right)\right\},\\
\phi_{12}^{T_1} &= \sqrt{1/72}\left\{2T_z^2 + 2R_3 + 2R_3^2 + T_z + T_z^3 + S_1 - 3S_2\right.\\
&\quad +\omega^2\left(2T_y^2 + 2R_4 + 2R_4^2 + T_y + T_y^3 + S_5 - 3S_6\right)\\
&\quad \left.+\omega\left(2T_x^2 + 2R_2 + 2R_2^2 + T_x + T_x^3 + S_3 - 3S_4\right)\right\},\\
\phi_{22}^{T_1} &= \sqrt{1/72}\left\{3E - T_x^2 - T_y^2 - T_z^2 - 2S_1 - 2S_3 - 2S_5\right.\\
&\quad +\omega\left(3R_1 - R_2 - R_3 - R_4 - 2T_x^3 - 2T_y^3 - 2T_z^3\right)\\
&\quad \left.+\omega^2\left(3R_1^2 - R_2^2 - R_3^2 - R_4^2 - 2T_x - 2T_y - 2T_z\right)\right\}
\end{aligned} \tag{A5.17}$$

如果取式 (3.77) 和 (3.78) 的表象, 则需做 X^{-1} 变换

$$\psi_{\mu\nu}^{T_1} = \sum_{\alpha\beta} X_{\nu\beta}\phi_{\alpha\beta}^{T_1}\left(X^{-1}\right)_{\alpha\mu} = \sum_{\alpha\beta} X_{\mu\alpha}^{*}\phi_{\alpha\beta}^{T_1}\left(X^{-1}\right)_{\beta\nu}^{*} \tag{A5.18}$$

计算结果为

$$\begin{aligned}
\psi_{11}^{T_1} &= \sqrt{1/8}\left\{E+T_x^2-T_y^2-T_z^2+T_x+T_x^3-S_3-S_4\right\}, \\
\psi_{21}^{T_1} &= \sqrt{1/8}\left\{T_z-T_z^3+S_1-S_2+R_1-R_2+R_3-R_4\right\}, \\
\psi_{31}^{T_1} &= \sqrt{1/8}\left\{-T_y+T_y^3+S_5-S_6+R_1^2-R_2^2-R_3^2+R_4^2\right\}, \\
\psi_{12}^{T_1} &= \sqrt{1/8}\left\{-T_z+T_z^3+S_1-S_2+R_1^2-R_2^2+R_3^2-R_4^2\right\}, \\
\psi_{22}^{T_1} &= \sqrt{1/8}\left\{E-T_x^2+T_y^2-T_z^2+T_y+T_y^3-S_5-S_6\right\}, \\
\psi_{32}^{T_1} &= \sqrt{1/8}\left\{T_x-T_x^3+S_3-S_4+R_1+R_2-R_3-R_4\right\}, \\
\psi_{13}^{T_1} &= \sqrt{1/8}\left\{T_y-T_y^3+S_5-S_6+R_1-R_2-R_3+R_4\right\}, \\
\psi_{23}^{T_1} &= \sqrt{1/8}\left\{-T_x+T_x^3+S_3-S_4+R_1^2+R_2^2-R_3^2-R_4^2\right\}, \\
\psi_{33}^{T_1} &= \sqrt{1/8}\left\{E-T_x^2-T_y^2+T_z^2+T_z+T_z^3-S_1-S_2\right\}
\end{aligned} \tag{A5.19}$$

对 D^{T_2} 表示, 因为表示矩阵 $D^{T_2}(R)$ 是 $D^B(R)$ 和 $D^{T_1}(R)$ 的直乘, 只要把函数基 $\phi_{\rho\lambda}^{T_1}$ 和 $\psi_{\mu\nu}^{T_1}$ 中, 与子群 T 有关项的系数保持不变, 而与陪集有关项的系数改符号, 就得到函数基 $\phi_{\rho\lambda}^{T_2}$ 和 $\psi_{\mu\nu}^{T_2}$ 的展开式.

附录 6　I 群群空间的不可约基

近年来, 碳 60 分子的研究受到很大重视, 它具有 I 群对称性. 在碳 60 各种能谱的计算中, 经常用到 I 群群空间的不可约基 $\phi_{\mu\nu}^{j}$. 这里严格按照前面用过的方法计算 I 群的不可约基. 由于篇幅所限, 略去常规的计算过程, 只给出计算的基本步骤和结果.

在 2.5 节我们已介绍过正二十面体及其对称群 I . 正二十面体有 6 个等价的五次转动轴, 10 个等价的三次转动轴和 15 个等价的二次转动轴, 它们都是双向轴. 每个转动轴对应的循环群生成元分别记作: T_j, $0 \leqslant j \leqslant 5$, R_k, $1 \leqslant k \leqslant 10$, 和 S_i, $1 \leqslant i \leqslant 15$. 生成元选为 T_0 和 S_1. 选不可约表示的表象, 使 T_0 的表示矩阵是对角化的, 对角元为 η^μ, $\eta = \exp(-\mathrm{i}2\pi/5)$, $\mu = -2,\ -1,\ 0,\ 1,\ 2$, mod 5, 即差 5 的倍数的两个 μ 数值被看成是相等的. I 群包含 60 个元素, 五个类, 有一个一维, 两个三维, 一个四维和一个五维不等价不可约表示, 分别记作 D^A, D^{T_1}, D^{T_2}, D^G 和 D^H. 特征标表见表 3.14. 用本征值的幂次 μ 来标记不可约表示的行列指标, 表示矩阵的行 (列) 排列次序为

$$\begin{aligned}
&D^A: 0; \qquad D^{T_1}: 1,\ 0,\ \overline{1}; \qquad D^{T_2}: 2,\ 0,\ \overline{2}; \\
&D^G: 2,\ 1,\ \overline{1},\ \overline{2}; \qquad D^H: 2,\ 1,\ 0,\ \overline{1},\ \overline{2}
\end{aligned} \tag{A6.1}$$

其中, $\overline{\mu} = -\mu$.

设 T_0 产生的循环子群为 H, 对于 H 不可约表示的投影算符为

$$P^{\mu}=\frac{1}{5}\sum_{\nu=-2}^{2}\eta^{-\mu\nu}T_0^{\nu},\qquad -2\leqslant\mu\leqslant 2 \tag{A6.2}$$

把投影算符从左面和从右面乘到任意元素 R 上, 计算出群代数中左乘和右乘 T_0 的共同本征矢量, 它们构成群空间的一组基

$$\Phi_{\mu\nu}=c\,P^{\mu}\,R\,P^{\nu}\ ,\qquad T_0\Phi_{\mu\nu}=\eta^{\mu}\Phi_{\mu\nu}\ ,\qquad \Phi_{\mu\nu}T_0=\eta^{\nu}\Phi_{\mu\nu} \tag{A6.3}$$

c 是可乘常数, 使基归一化. 通过选择 R 来寻找完备的新基. R 的不同选择除了改变可乘常数外, 不会影响计算结果. 在下面计算中, R 分别选 E, S_{11}, S_5 和 S_{10}. 计算结果为

$$\begin{aligned}
\Phi_{\mu\mu}^{(1)} &= \left(E+\eta^{-\mu}T_0+\eta^{-2\mu}T_0^2+\eta^{2\mu}T_0^3+\eta^{\mu}T_0^4\right)/\sqrt{5},\\
\Phi_{\mu\overline{\mu}}^{(2)} &= \left(S_{11}+\eta^{-\mu}S_{14}+\eta^{-2\mu}S_{12}+\eta^{2\mu}S_{15}+\eta^{\mu}S_{13}\right)/\sqrt{5},\\
\Phi_{\mu\nu}^{(3)} &= \left\{\left(S_5+\eta^{-\mu}R_5^2+\eta^{-2\mu}T_1^4+\eta^{2\mu}T_4+\eta^{\mu}R_4\right)\right.\\
&\quad+\eta^{(\mu-\nu)}\left(S_4+\eta^{-\mu}R_4^2+\eta^{-2\mu}T_5^4+\eta^{2\mu}T_3+\eta^{\mu}R_3\right)\\
&\quad+\eta^{2(\mu-\nu)}\left(S_3+\eta^{-\mu}R_3^2+\eta^{-2\mu}T_4^4+\eta^{2\mu}T_2+\eta^{\mu}R_2\right)\\
&\quad+\eta^{-2(\mu-\nu)}\left(S_2+\eta^{-\mu}R_2^2+\eta^{-2\mu}T_3^4+\eta^{2\mu}T_1+\eta^{\mu}R_1\right)\\
&\quad\left.+\eta^{-(\mu-\nu)}\left(S_1+\eta^{-\mu}R_1^2+\eta^{-2\mu}T_2^4+\eta^{2\mu}T_5+\eta^{\mu}R_5\right)\right\}/5,\\
\Phi_{\mu\nu}^{(4)} &= \left\{\left(S_{10}+\eta^{-\mu}T_1^3+\eta^{-2\mu}R_6^2+\eta^{2\mu}R_9+\eta^{\mu}T_5^2\right)\right.\\
&\quad+\eta^{(\mu-\nu)}\left(S_9+\eta^{-\mu}T_5^3+\eta^{-2\mu}R_{10}^2+\eta^{2\mu}R_8+\eta^{\mu}T_4^2\right)\\
&\quad+\eta^{2(\mu-\nu)}\left(S_8+\eta^{-\mu}T_4^3+\eta^{-2\mu}R_9^2+\eta^{2\mu}R_7+\eta^{\mu}T_3^2\right)\\
&\quad+\eta^{-2(\mu-\nu)}\left(S_7+\eta^{-\mu}T_3^3+\eta^{-2\mu}R_8^2+\eta^{2\mu}R_6+\eta^{\mu}T_2^2\right)\\
&\quad\left.+\eta^{-(\mu-\nu)}\left(S_6+\eta^{-\mu}T_2^3+\eta^{-2\mu}R_7^2+\eta^{2\mu}R_{10}+\eta^{\mu}T_1^2\right)\right\}/5
\end{aligned} \tag{A6.4}$$

选用 C_5 类的元素之和 W 来区分新基所属的表示

$$\begin{aligned}
&W=\sum_{j=0}^{5}\left(T_j+T_j^4\right),\qquad D^j(W)=\alpha^j\mathbf{1},\qquad \eta=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi/5},\\
&p=\eta+\eta^{-1}=(\sqrt{5}-1)/2,\qquad p^{-1}=-\eta^2-\eta^{-2}=(\sqrt{5}+1)/2,\\
&\alpha^A=12,\qquad \alpha^{T_1}=4p^{-1},\qquad \alpha^{T_2}=-4p,\qquad \alpha^G=-3,\qquad \alpha^H=0
\end{aligned} \tag{A6.5}$$

对应给定的下标 μ 和 ν, 要计算 W 算符在这组基 $\Phi_{\mu\nu}^{(r)}$ 中的矩阵形式及其本征矢量. 计算中不必列出全部项, 只要列出四项 E, S_{11}, S_5 和 S_{10} 的系数, 就可定出 W 的矩阵形式. 有了矩阵形式就可计算本征矢量. 当 $\mu=\nu=0$ 时, 有四个基 $\Phi_{00}^{(1)}$,

$\Phi_{00}^{(2)}$, $\Phi_{00}^{(3)}$ 和 $\Phi_{00}^{(4)}$, W 算符在这组基中的矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 2\sqrt{5} & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 2\sqrt{5} \\ 2\sqrt{5} & 0 & 6 & 4 \\ 0 & 2\sqrt{5} & 4 & 6 \end{pmatrix}$$

对应本征值 12, $4p^{-1}$, $-4p$ 和 0 的本征矢量分别为

$$\frac{1}{\sqrt{12}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \sqrt{5} \\ \sqrt{5} \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{12}}\begin{pmatrix} \sqrt{5} \\ \sqrt{5} \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{A6.6}$$

当 $\mu = \nu \neq 0$ 时, 有三个基 $\Phi_{\mu\mu}^{(1)}$, $\Phi_{\mu\mu}^{(3)}$ 和 $\Phi_{\mu\mu}^{(4)}$, 在这组基中 W 的矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} \eta^{\mu}+\eta^{-\mu} & \sqrt{5}\left(\eta^{2\mu}+\eta^{-2\mu}\right) & 0 \\ \sqrt{5}\left(\eta^{2\mu}+\eta^{-2\mu}\right) & -2\eta^{2\mu}-2\eta^{-2\mu} & \left(\eta^{2\mu}+\eta^{-2\mu}\right)^2 \\ 0 & \left(\eta^{2\mu}+\eta^{-2\mu}\right)^2 & -\left(\eta^{\mu}+\eta^{-\mu}\right)^2 \end{pmatrix}$$

当 $\mu = 1$ 或 -1 时, 对应本征值 $4p^{-1}$, -3 和 0 的本征矢量分别为

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -p^{-1} \\ -p \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{12}}\begin{pmatrix} \sqrt{5} \\ p^2 \\ p^{-2} \end{pmatrix}$$

当 $\mu = 2$ 或 -2 时, 对应本征值 $-4p$, -3 和 0 的本征矢量分别为

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -p \\ -p^{-1} \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{12}}\begin{pmatrix} \sqrt{5} \\ p^{-2} \\ p^2 \end{pmatrix}$$

当 $\mu = -\nu = \pm 1$ 时, 有三个基 $\Phi_{\pm 1,\mp 1}^{(2)}$, $\Phi_{\pm 1,\mp 1}^{(3)}$ 和 $\Phi_{\pm 1,\mp 1}^{(4)}$, 在这组基中 W 的矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} p & 0 & -\eta^{\pm 1}\left(2+p^{-1}\right) \\ 0 & -p^2 & \eta^{\pm 1}p^{-2} \\ -\eta^{\mp 1}\left(2+p^{-1}\right) & \eta^{\mp 1}p^{-2} & 2p^{-1} \end{pmatrix}$$

对应本征值 $4p^{-1}$, -3 和 0 的本征矢量分别为

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -p \\ -\eta^{\mp 1}p^{-1} \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ \eta^{\mp 1} \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{12}}\begin{pmatrix} \sqrt{5} \\ p^{-2} \\ \eta^{\mp 1}p^2 \end{pmatrix}$$

当 $\mu=-\nu=\pm2$ 时, 有三个基 $\Phi^{(2)}_{\pm2,\mp2}$, $\Phi^{(3)}_{\pm2,\mp2}$ 和 $\Phi^{(4)}_{\pm2,\mp2}$, 在这组基中 W 的矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} -p^{-1} & 0 & \eta^{\pm2}(2-p) \\ 0 & -p^{-2} & \eta^{\pm2}p^2 \\ \eta^{\mp2}(2-p) & \eta^{\mp2}p^2 & -2p \end{pmatrix}$$

对应本征值 $-4p$, -3 和 0 的本征矢量分别为

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -p^{-1} \\ -\eta^{\mp2}p \end{pmatrix},\qquad \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -\eta^{\mp2} \end{pmatrix},\qquad \frac{1}{\sqrt{12}}\begin{pmatrix} \sqrt{5} \\ p^2 \\ \eta^{\mp2}p^{-2} \end{pmatrix}$$

当 $\mu=0$ 和 $\nu\neq0$ 时, 有两个基 $\Phi^{(3)}_{0\nu}$ 和 $\Phi^{(4)}_{0\nu}$, 在这组基中 W 的矩阵形式为

$$2\begin{pmatrix} -\eta^{2\nu}-\eta^{-2\nu} & 1+\eta^{-\nu} \\ 1+\eta^{\nu} & -\eta^{2\nu}-\eta^{-2\nu} \end{pmatrix}$$

对应本征值 $-4\left(\eta^{2\nu}+\eta^{-2\nu}\right)$ 和 0 的本征矢量分别为

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \eta^{2\nu} \\ -1 \end{pmatrix},\qquad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \eta^{2\nu} \\ 1 \end{pmatrix}$$

当 $\mu\neq0$ 和 $\nu=0$ 时, 有两个基 $\Phi^{(3)}_{\mu0}$ 和 $\Phi^{(4)}_{\mu0}$, 在这组基中 W 的矩阵形式为

$$2\begin{pmatrix} -\eta^{2\mu}-\eta^{-2\mu} & 1+\eta^{\mu} \\ 1+\eta^{-\mu} & -\eta^{2\mu}-\eta^{-2\mu} \end{pmatrix}$$

对应本征值 $-4\left(\eta^{2\mu}+\eta^{-2\mu}\right)$ 和 0 的本征矢量分别为

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -\eta^{2\mu} \end{pmatrix},\qquad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \eta^{2\mu} \end{pmatrix}$$

当 $0\neq\mu\neq\nu\neq0$ 和 $\mu\neq-\nu$ 时, 令 $\zeta=\eta^{(\mu-\nu)}$, 有两个基 $\Phi^{(3)}_{\mu\nu}$ 和 $\Phi^{(4)}_{\mu\nu}$, 在这组基中 W 的矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} -\left(\zeta+\zeta^{-1}\right)^2 & -\zeta^{-2} \\ -\zeta^2 & -\left(\zeta^2+\zeta^{-2}\right)^2 \end{pmatrix}$$

对应本征值 -3 和 0 的本征矢量分别为

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} \zeta+\zeta^{-1} \\ -\zeta^2\left(\zeta^2+\zeta^{-2}\right) \end{pmatrix},\qquad \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} \zeta^2+\zeta^{-2} \\ \zeta^2\left(\zeta+\zeta^{-1}\right) \end{pmatrix}$$

现在我们可以写出属 I 群各不等价不可约表示的标准基和计算生成元的标准形式.

$$\begin{gathered}\phi_{00}^{A}=\left(\varPhi_{00}^{(1)}+\varPhi_{00}^{(2)}+\sqrt{5}\varPhi_{00}^{(3)}+\sqrt{5}\varPhi_{00}^{(4)}\right)/\sqrt{12},\\ D^{A}(T_0)=D^{A}(S_1)=1\end{gathered}\tag{A6.7}$$

$$\begin{aligned}\phi_{11}^{T_1}&=\left(\varPhi_{11}^{(1)}-p^{-1}\varPhi_{11}^{(3)}-p\varPhi_{11}^{(4)}\right)/2,\\ \phi_{01}^{T_1}&=\left(-\eta^{-1}\varPhi_{01}^{(3)}+\eta^{2}\varPhi_{01}^{(4)}\right)/\sqrt{2},\\ \phi_{\bar{1}1}^{T_1}&=\left(\eta^{-2}\varPhi_{\bar{1}1}^{(2)}-p\eta^{-2}\varPhi_{\bar{1}1}^{(3)}-p^{-1}\eta^{-1}\varPhi_{\bar{1}1}^{(4)}\right)/2,\\ \phi_{10}^{T_1}&=\left(-\eta\varPhi_{10}^{(3)}+\eta^{-2}\varPhi_{10}^{(4)}\right)/\sqrt{2},\\ \phi_{00}^{T_1}&=\left(\varPhi_{00}^{(1)}-\varPhi_{00}^{(2)}+\varPhi_{00}^{(3)}-\varPhi_{00}^{(4)}\right)/2,\\ \phi_{\bar{1}0}^{T_1}&=\left(\eta^{-1}\varPhi_{\bar{1}0}^{(3)}-\eta^{2}\varPhi_{\bar{1}0}^{(4)}\right)/\sqrt{2},\\ \phi_{1\bar{1}}^{T_1}&=\left(\eta^{2}\varPhi_{1\bar{1}}^{(2)}-p\eta^{2}\varPhi_{1\bar{1}}^{(3)}-p^{-1}\eta\varPhi_{1\bar{1}}^{(4)}\right)/2,\\ \phi_{0\bar{1}}^{T_1}&=\left(\eta\varPhi_{0\bar{1}}^{(3)}-\eta^{-2}\varPhi_{0\bar{1}}^{(4)}\right)/\sqrt{2},\\ \phi_{\bar{1}\bar{1}}^{T_1}&=\left(\varPhi_{\bar{1}\bar{1}}^{(1)}-p^{-1}\varPhi_{\bar{1}\bar{1}}^{(3)}-p\varPhi_{\bar{1}\bar{1}}^{(4)}\right)/2\end{aligned}\tag{A6.8}$$

$$D^{T_1}(T_0)=\begin{pmatrix}\eta&0&0\\0&1&0\\0&0&\eta^{-1}\end{pmatrix},\qquad D^{T_1}(S_1)=\frac{-1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}p^{-1}&\sqrt{2}&p\\\sqrt{2}&-1&-\sqrt{2}\\p&-\sqrt{2}&p^{-1}\end{pmatrix}\tag{A6.9}$$

$$\begin{aligned}\phi_{22}^{T_2}&=\left(\varPhi_{22}^{(1)}-p\varPhi_{22}^{(3)}-p^{-1}\varPhi_{22}^{(4)}\right)/2,\\ \phi_{02}^{T_2}&=\left(\eta^{-2}\varPhi_{02}^{(3)}-\eta^{-1}\varPhi_{02}^{(4)}\right)/\sqrt{2},\\ \phi_{\bar{2}2}^{T_2}&=\left(-\eta\varPhi_{\bar{2}2}^{(2)}+p^{-1}\eta\varPhi_{\bar{2}2}^{(3)}+p\eta^{-2}\varPhi_{\bar{2}2}^{(4)}\right)/2,\\ \phi_{20}^{T_2}&=\left(\eta^{2}\varPhi_{20}^{(3)}-\eta\varPhi_{20}^{(4)}\right)/\sqrt{2},\\ \phi_{00}^{T_2}&=\left(\varPhi_{00}^{(1)}-\varPhi_{00}^{(2)}-\varPhi_{00}^{(3)}+\varPhi_{00}^{(4)}\right)/2,\\ \phi_{\bar{2}0}^{T_2}&=\left(\eta^{-2}\varPhi_{\bar{2}0}^{(3)}-\eta^{-1}\varPhi_{\bar{2}0}^{(4)}\right)/\sqrt{2},\\ \phi_{2\bar{2}}^{T_2}&=\left(-\eta^{-1}\varPhi_{2\bar{2}}^{(2)}+p^{-1}\eta^{-1}\varPhi_{2\bar{2}}^{(3)}+p\eta^{2}\varPhi_{2\bar{2}}^{(4)}\right)/2,\\ \phi_{0\bar{2}}^{T_2}&=\left(\eta^{2}\varPhi_{0\bar{2}}^{(3)}-\eta\varPhi_{0\bar{2}}^{(4)}\right)/\sqrt{2},\\ \phi_{\bar{2}\bar{2}}^{T_2}&=\left(\varPhi_{\bar{2}\bar{2}}^{(1)}-p\varPhi_{\bar{2}\bar{2}}^{(3)}-p^{-1}\varPhi_{\bar{2}\bar{2}}^{(4)}\right)/2\end{aligned}\tag{A6.10}$$

$$D^{T_2}(T_0)=\begin{pmatrix}\eta^{2}&0&0\\0&1&0\\0&0&\eta^{-2}\end{pmatrix},\qquad D^{T_2}(S_1)=\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}-p&\sqrt{2}&p^{-1}\\\sqrt{2}&-1&\sqrt{2}\\p^{-1}&\sqrt{2}&-p\end{pmatrix}\tag{A6.11}$$

$$
\begin{aligned}
\phi^G_{22} &= \left(\Phi^{(1)}_{22} - \Phi^{(3)}_{22} + \Phi^{(4)}_{22}\right)/\sqrt{3}, \\
\phi^G_{12} &= \left(-p\eta^{-1}\Phi^{(3)}_{12} - p^{-1}\eta^2\Phi^{(4)}_{12}\right)/\sqrt{3}, \\
\phi^G_{\overline{1}2} &= \left(-p^{-1}\eta^2\Phi^{(3)}_{\overline{1}2} - p\eta\Phi^{(4)}_{\overline{1}2}\right)/\sqrt{3}, \\
\phi^G_{\overline{2}2} &= \left(\eta\Phi^{(2)}_{\overline{2}2} + \eta\Phi^{(3)}_{\overline{2}2} - \eta^{-2}\Phi^{(4)}_{\overline{2}2}\right)/\sqrt{3}, \\
\phi^G_{21} &= \left(-p\eta\Phi^{(3)}_{21} - p^{-1}\eta^{-2}\Phi^{(4)}_{21}\right)/\sqrt{3}, \\
\phi^G_{11} &= \left(\Phi^{(1)}_{11} + \Phi^{(3)}_{11} - \Phi^{(4)}_{11}\right)/\sqrt{3}, \\
\phi^G_{\overline{1}1} &= \left(\eta^{-2}\Phi^{(2)}_{\overline{1}1} - \eta^{-2}\Phi^{(3)}_{\overline{1}1} + \eta^{-1}\Phi^{(4)}_{\overline{1}1}\right)/\sqrt{3}, \\
\phi^G_{\overline{2}1} &= \left(-p^{-1}\eta^2\Phi^{(3)}_{\overline{2}1} - p\eta\Phi^{(4)}_{\overline{2}1}\right)/\sqrt{3}, \\
\phi^G_{2\overline{1}} &= \left(-p^{-1}\eta^{-2}\Phi^{(3)}_{2\overline{1}} - p\eta^{-1}\Phi^{(4)}_{2\overline{1}}\right)/\sqrt{3}, \\
\phi^G_{1\overline{1}} &= \left(\eta^2\Phi^{(2)}_{1\overline{1}} - \eta^2\Phi^{(3)}_{1\overline{1}} + \eta\Phi^{(4)}_{1\overline{1}}\right)/\sqrt{3}, \\
\phi^G_{\overline{1}\,\overline{1}} &= \left(\Phi^{(1)}_{\overline{1}\,\overline{1}} + \Phi^{(3)}_{\overline{1}\,\overline{1}} - \Phi^{(4)}_{\overline{1}\,\overline{1}}\right)/\sqrt{3}, \\
\phi^G_{\overline{2}\,\overline{1}} &= \left(-p\eta^{-1}\Phi^{(3)}_{\overline{2}\,\overline{1}} - p^{-1}\eta^2\Phi^{(4)}_{\overline{2}\,\overline{1}}\right)/\sqrt{3}, \\
\phi^G_{2\overline{2}} &= \left(\eta^{-1}\Phi^{(2)}_{2\overline{2}} + \eta^{-1}\Phi^{(3)}_{2\overline{2}} - \eta^2\Phi^{(4)}_{2\overline{2}}\right)/\sqrt{3}, \\
\phi^G_{1\overline{2}} &= \left(-p^{-1}\eta^{-2}\Phi^{(3)}_{1\overline{2}} - p\eta^{-1}\Phi^{(4)}_{1\overline{2}}\right)/\sqrt{3}, \\
\phi^G_{\overline{1}\,\overline{2}} &= \left(-p\eta\Phi^{(3)}_{\overline{1}\,\overline{2}} - p^{-1}\eta^{-2}\Phi^{(4)}_{\overline{1}\,\overline{2}}\right)/\sqrt{3}, \\
\phi^G_{\overline{2}\,\overline{2}} &= \left(\Phi^{(1)}_{\overline{2}\,\overline{2}} - \Phi^{(3)}_{\overline{2}\,\overline{2}} + \Phi^{(4)}_{\overline{2}\,\overline{2}}\right)/\sqrt{3}
\end{aligned}
\tag{A6.12}
$$

$$
\begin{aligned}
&D^G(T_0) = \text{diag}\{\eta^2,\ \eta,\ \eta^{-1},\ \eta^{-2}\} \\
&D^G(S_1) = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} -1 & -p & -p^{-1} & 1 \\ -p & 1 & -1 & -p^{-1} \\ -p^{-1} & -1 & 1 & -p \\ 1 & -p^{-1} & -p & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{A6.13}
$$

$$
\begin{aligned}
\phi^H_{22} &= \left(\sqrt{5}\Phi^{(1)}_{22} + p^{-2}\Phi^{(3)}_{22} + p^2\Phi^{(4)}_{22}\right)/\sqrt{12}, \\
\phi^H_{12} &= \left(p^{-1}\eta^{-1}\Phi^{(3)}_{12} - p\eta^2\Phi^{(4)}_{12}\right)/\sqrt{3}, \\
\phi^H_{02} &= \left(\eta^{-2}\Phi^{(3)}_{02} + \eta^{-1}\Phi^{(4)}_{02}\right)/\sqrt{2}, \\
\phi^H_{\overline{1}2} &= \left(p\eta^2\Phi^{(3)}_{\overline{1}2} - p^{-1}\eta\Phi^{(4)}_{\overline{1}2}\right)/\sqrt{3}, \\
\phi^H_{\overline{2}2} &= \left(\sqrt{5}\eta\Phi^{(2)}_{\overline{2}2} + p^2\eta\Phi^{(3)}_{\overline{2}2} + p^{-2}\eta^{-2}\Phi^{(4)}_{\overline{2}2}\right)/\sqrt{12},
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\phi_{21}^{H} &= \left(p^{-1}\eta\,\Phi_{21}^{(3)} - p\eta^{-2}\,\Phi_{21}^{(4)}\right)/\sqrt{3},\\
\phi_{11}^{H} &= \left(\sqrt{5}\,\Phi_{11}^{(1)} + p^{2}\,\Phi_{11}^{(3)} + p^{-2}\,\Phi_{11}^{(4)}\right)/\sqrt{12},\\
\phi_{01}^{H} &= \left(-\eta^{-1}\,\Phi_{01}^{(3)} - \eta^{2}\,\Phi_{01}^{(4)}\right)/\sqrt{2},\\
\phi_{\bar{1}1}^{H} &= \left(-\sqrt{5}\eta^{-2}\,\Phi_{\bar{1}1}^{(2)} - p^{-2}\eta^{-2}\,\Phi_{\bar{1}1}^{(3)} - p^{2}\eta^{-1}\,\Phi_{\bar{1}1}^{(4)}\right)/\sqrt{12},\\
\phi_{\bar{2}1}^{H} &= \left(-p\eta^{2}\,\Phi_{\bar{2}1}^{(3)} + p^{-1}\eta\,\Phi_{\bar{2}1}^{(4)}\right)/\sqrt{3},\\
\phi_{20}^{H} &= \left(\eta^{2}\,\Phi_{20}^{(3)} + \eta\,\Phi_{20}^{(4)}\right)/\sqrt{2},\\
\phi_{10}^{H} &= \left(-\eta\,\Phi_{10}^{(3)} - \eta^{-2}\,\Phi_{10}^{(4)}\right)/\sqrt{2},\\
\phi_{00}^{H} &= \left(\sqrt{5}\,\Phi_{00}^{(1)} + \sqrt{5}\,\Phi_{00}^{(2)} - \Phi_{00}^{(3)} - \Phi_{00}^{(4)}\right)/\sqrt{12},\\
\phi_{\bar{1}0}^{H} &= \left(\eta^{-1}\,\Phi_{\bar{1}0}^{(3)} + \eta^{2}\,\Phi_{\bar{1}0}^{(4)}\right)/\sqrt{2},\\
\phi_{\bar{2}0}^{H} &= \left(\eta^{-2}\,\Phi_{\bar{2}0}^{(3)} + \eta^{-1}\,\Phi_{\bar{2}0}^{(4)}\right)/\sqrt{2},\\
\phi_{2\bar{1}}^{H} &= \left(p\eta^{-2}\,\Phi_{2\bar{1}}^{(3)} - p^{-1}\eta^{-1}\,\Phi_{2\bar{1}}^{(4)}\right)/\sqrt{3},\\
\phi_{1\bar{1}}^{H} &= \left(-\sqrt{5}\eta^{2}\,\Phi_{1\bar{1}}^{(2)} - p^{-2}\eta^{2}\,\Phi_{1\bar{1}}^{(3)} - p^{2}\eta\,\Phi_{1\bar{1}}^{(4)}\right)/\sqrt{12},\\
\phi_{0\bar{1}}^{H} &= \left(\eta\,\Phi_{0\bar{1}}^{(3)} + \eta^{-2}\,\Phi_{0\bar{1}}^{(4)}\right)/\sqrt{2},\\
\phi_{\bar{1}\bar{1}}^{H} &= \left(\sqrt{5}\,\Phi_{\bar{1}\bar{1}}^{(1)} + p^{2}\,\Phi_{\bar{1}\bar{1}}^{(3)} + p^{-2}\,\Phi_{\bar{1}\bar{1}}^{(4)}\right)/\sqrt{12},\\
\phi_{\bar{2}\bar{1}}^{H} &= \left(-p^{-1}\eta^{-1}\,\Phi_{\bar{2}\bar{1}}^{(3)} + p\eta^{2}\,\Phi_{\bar{2}\bar{1}}^{(4)}\right)/\sqrt{3},\\
\phi_{2\bar{2}}^{H} &= \left(\sqrt{5}\eta^{-1}\,\Phi_{2\bar{2}}^{(2)} + p^{2}\eta^{-1}\,\Phi_{2\bar{2}}^{(3)} + p^{-2}\eta^{2}\,\Phi_{2\bar{2}}^{(4)}\right)/\sqrt{12},\\
\phi_{1\bar{2}}^{H} &= \left(-p\eta^{-2}\,\Phi_{1\bar{2}}^{(3)} + p^{-1}\eta^{-1}\,\Phi_{1\bar{2}}^{(4)}\right)/\sqrt{3},\\
\phi_{0\bar{2}}^{H} &= \left(\eta^{2}\,\Phi_{0\bar{2}}^{(3)} + \eta\,\Phi_{0\bar{2}}^{(4)}\right)/\sqrt{2},\\
\phi_{\bar{1}\bar{2}}^{H} &= \left(-p^{-1}\eta\,\Phi_{\bar{1}\bar{2}}^{(3)} + p\eta^{-2}\,\Phi_{\bar{1}\bar{2}}^{(4)}\right)/\sqrt{3},\\
\phi_{\bar{2}\bar{2}}^{H} &= \left(\sqrt{5}\,\Phi_{\bar{2}\bar{2}}^{(1)} + p^{-2}\,\Phi_{\bar{2}\bar{2}}^{(3)} + p^{2}\,\Phi_{\bar{2}\bar{2}}^{(4)}\right)/\sqrt{12}
\end{aligned}
\qquad (A6.14)
$$

$$
D^{H}(T_0) = \mathrm{diag}\{\eta^{2},\ \eta,\ 1,\ \eta^{-1},\ \eta^{-2}\},
$$

$$
D^{H}(S_1) = \frac{1}{5}\begin{pmatrix}
p^{-2} & 2p^{-1} & \sqrt{6} & 2p & p^{2}\\
2p^{-1} & p^{2} & -\sqrt{6} & -p^{-2} & -2p\\
\sqrt{6} & -\sqrt{6} & -1 & \sqrt{6} & \sqrt{6}\\
2p & -p^{-2} & \sqrt{6} & p^{2} & -2p^{-1}\\
p^{2} & -2p & \sqrt{6} & -2p^{-1} & p^{-2}
\end{pmatrix}
\qquad (A6.15)
$$

附录 7 SO(3) 群和 SU(2) 群的同态关系

我们来证明 SO(3) 群元素 $R(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$ 和 SU(2) 群的元素 $\pm u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$ 间的一二对应关系式 (4.41), 即

$$u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)\,(\vec{\sigma}\cdot\vec{r})\,u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)^{-1}=\vec{\sigma}\cdot[R(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)\vec{r}] \tag{A7.1}$$

把 $\vec{r}$ 分解为平行和垂直 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向的分量

$$\vec{r}=\hat{\boldsymbol{n}}a+\hat{\boldsymbol{m}}b\,,\qquad \hat{\boldsymbol{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{m}}=0\,,\qquad (\vec{\sigma}\cdot\vec{r})=\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}a+\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{m}}b \tag{A7.2}$$

利用式 (4.34) 直接计算可得

$$\begin{aligned}&u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})\,u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)^{-1}=\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}},\\&u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{m}})\,u(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)^{-1}=\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{m}}',\\&\hat{\boldsymbol{m}}'=\hat{\boldsymbol{m}}\cos\omega+(\hat{\boldsymbol{n}}\times\hat{\boldsymbol{m}})\sin\omega\end{aligned} \tag{A7.3}$$

前式是显然的, 后式证明中要注意 $\hat{\boldsymbol{m}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 互相垂直. 证明如下

$$\begin{aligned}&\left\{\mathbf{1}\cos\left(\frac{\omega}{2}\right)-\mathrm{i}\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})\sin\left(\frac{\omega}{2}\right)\right\}(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{m}})\left\{\mathbf{1}\cos\left(\frac{\omega}{2}\right)+\mathrm{i}\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})\sin\left(\frac{\omega}{2}\right)\right\}\\&=(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{m}})\left\{\cos\left(\frac{\omega}{2}\right)\right\}^2-\frac{\mathrm{i}}{2}\sin\omega\,\{(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{m}})-(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{m}})\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})\}\\&\quad+(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{m}})\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})\left\{\sin\left(\frac{\omega}{2}\right)\right\}^2\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{m}})-(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{m}})\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})=2\mathrm{i}\vec{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{n}}\times\hat{\boldsymbol{m}})\\&(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{m}})\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})=\mathrm{i}\,\{\vec{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{n}}\times\hat{\boldsymbol{m}})\}\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})\\&\quad=-\vec{\sigma}\cdot\{(\hat{\boldsymbol{n}}\times\hat{\boldsymbol{m}})\times\hat{\boldsymbol{n}}\}=-\vec{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{m}}\end{aligned}$$

希望读者能独立地做此计算, 以熟悉矩阵矢量 $\vec{\sigma}$ 的运算方法. 这种方法本书中将多次用到. 把式 (A7.3) 代入式 (A7.1) 右边, 得 $\vec{\sigma}\cdot\vec{r'}$

$$\vec{r'}=\hat{\boldsymbol{n}}a+\hat{\boldsymbol{m}}b\cos\omega+(\hat{\boldsymbol{n}}\times\hat{\boldsymbol{m}})\,b\sin\omega=R(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)\vec{r} \tag{A7.4}$$

从图 A7.1 容易看出, 位置矢量 $\vec{r}$ 经转动 $R(\hat{\boldsymbol{n}},\omega)$ 后, 正好变成矢量 $\vec{r'}$. 这就是式 (A7.1).

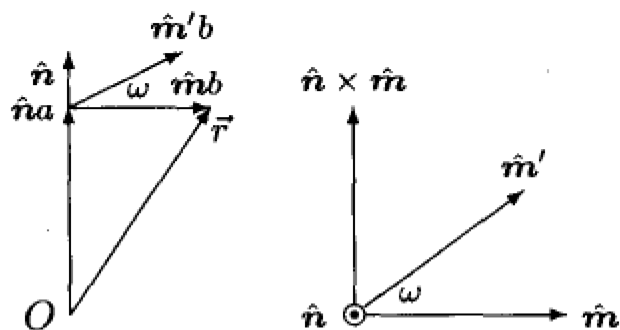


图 A7.1 矢量绕 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向转动 ω 角的变换

附录 8　采用欧拉角参数时的群上积分元

计算的困难主要在于恒元邻近的一个测度为零的区域 ($\beta=0$), 群参数和群元素是多一对应的. 这样, 恒元邻近的密度函数 W_0 以正比于 β 的方式趋于零. 同时, 恒元邻近元素的参数也不都趋于零.

设恒元邻近元素 A 的三个欧拉角参数为 $(\alpha_0,\beta_0,\gamma_0)$, 则可取

$$\alpha_0=-\gamma_0+r\ ,\qquad \beta_0=t$$

其中, γ_0 是有限数, r 和 t 是无穷小量. 按照式 (4.47), 令 $AR=R'$, 要计算

$$\frac{W(A)}{W(R)}=\frac{W(\alpha_0,\beta_0,\gamma_0)}{W(\alpha,\beta,\gamma)}=\frac{W_0t}{W(\alpha,\beta,\gamma)}=\begin{vmatrix}\dfrac{\partial\alpha'}{\partial\alpha_0} & \dfrac{\partial\alpha'}{\partial\beta_0} & \dfrac{\partial\alpha'}{\partial\gamma_0}\\ \dfrac{\partial\beta'}{\partial\alpha_0} & \dfrac{\partial\beta'}{\partial\beta_0} & \dfrac{\partial\beta'}{\partial\gamma_0}\\ \dfrac{\partial\gamma'}{\partial\alpha_0} & \dfrac{\partial\gamma'}{\partial\beta_0} & \dfrac{\partial\gamma'}{\partial\gamma_0}\end{vmatrix} \tag{A8.1}$$

在 R 参数不变的条件下对 α_0(即 r), β_0(即 t) 和 γ_0 求偏微商, 计算结果保留到 t 和 r 的一级小量. 引入符号

$$\begin{array}{llll} s_\alpha=\sin\alpha, & c_\alpha=\cos\alpha, & s_0=\sin\gamma_0, & c_0=\cos\gamma_0,\\ s_\beta=\sin\beta, & c_\beta=\cos\beta, & \sin\beta_0=t, & \sin\alpha_0=-s_0+rc_0+r^2s_0/2,\\ s_\gamma=\sin\gamma, & c_\gamma=\cos\gamma, & \cos\beta_0=1-t^2/2, & \cos\alpha_0=c_0+rs_0-r^2c_0/2 \end{array}$$

由式 (4.60) 得

$$R(\alpha_0,\beta_0,\gamma_0)=\begin{pmatrix}1-r^2/2-t^2c_0^2/2 & -r-t^2c_0s_0/2 & tc_0+rts_0\\ r-t^2s_0c_0/2 & 1-r^2/2-t^2s_0^2/2 & ts_0+rtc_0\\ -tc_0 & ts_0 & 1-t^2/2\end{pmatrix}$$

代入

$$R(\alpha_0,\beta_0,\gamma_0)R(\alpha,\beta,\gamma)=R(\alpha',\beta',\gamma') \tag{A8.2}$$

利用式 (4.60) 计算 α', β' 和 γ'. 先比较等式 (A8.2) 两边矩阵的第三行第三列元素, 解出 β'

$$\begin{aligned}\cos\beta' &= c_\beta-ts_\beta\cos(\alpha+\gamma_0)-t^2c_\beta/2,\\ \beta' &= \beta+t\cos(\alpha+\gamma_0)+t^2(c_\beta/s_\beta)\sin^2(\alpha+\gamma_0)\,,\\ \sin\beta' &= s_\beta+tc_\beta\cos(\alpha+\gamma_0)-t^2s_\beta/2+(t^2/s_\beta)\sin^2(\alpha+\gamma_0)\end{aligned}$$

其次, 比较矩阵的第三行第一列 (或第二列) 元素, 解出 γ'

$$
\begin{aligned}
&-\sin\beta'\cos\gamma' = -s_\beta c_\gamma - tc_\beta c_\gamma\cos(\alpha+\gamma_0) + ts_\gamma\sin(\alpha+\gamma_0) + t^2 s_\beta c_\gamma/2,\\
&\cos\gamma' = c_\gamma - t(s_\gamma/s_\beta)\sin(\alpha+\gamma_0) + \cdots,\\
&\gamma' = \gamma + (t/s_\beta)\sin(\alpha+\gamma_0) + \cdots
\end{aligned}
$$

其中, 删去的部分是关于 t^2 的项. 由于 β' 和 γ' 都与 r 无关, 它们对 γ_0 的偏微商都是一级小量, 对 α' 的计算也只需要算到一级小量. 比较矩阵的第一行 (或第二行) 第三列元素, 得

$$
\begin{aligned}
&\sin\beta'\cos\alpha' = c_\alpha s_\beta - rs_\alpha s_\beta + tc_\beta c_0,\\
&\cos\alpha' = c_\alpha - rs_\alpha + t(s_\alpha c_\beta/s_\beta)\sin(\alpha+\gamma_0),\\
&\alpha' = \alpha + r - t\cot\beta\sin(\alpha+\gamma_0)
\end{aligned}
$$

代入式 (4.47) 得

$$
\frac{W_0 t}{W(\alpha,\beta,\gamma)} = \begin{vmatrix} 1 & -\cot\beta\sin(\alpha+\gamma_0) & 1 \\ 0 & \cos(\gamma_0+\alpha) & -t\sin(\alpha+\gamma_0) \\ 0 & \sin(\alpha+\gamma_0)/\sin\beta & t\cos(\alpha+\gamma_0)/\sin\beta \end{vmatrix} = \frac{t}{\sin\beta} \tag{A8.3}
$$

得 $W(\alpha,\beta,\gamma) = W_0\sin\beta$, 归一化后得式 (4.65).

附录 9 三维转动群的表示矩阵 $d^j(\beta)$

为简化符号, 下面关于矩阵元素 $d^j_{\nu\mu}(\omega)$ 的表式中, $c=\cos(\omega/2)$ 和 $s=\sin(\omega/2)$. 式 (4.74) 给出 $d^j(\omega)$ 矩阵的一些对称性质, 使得有些矩阵元素可以很容易地由另一些矩阵元素算出. 如把 ω 换成 $\pi-\omega$, 只是把表式中 s 和 c 互换, 又如由

$$
d^j_{\nu\mu}(\omega) = (-1)^{\mu-\nu} d^j_{-\nu-\mu}(\omega) = (-1)^{\mu-\nu} d^j_{\mu\nu}(\omega) = (-1)^{j+\nu} d^j_{\nu(-\mu)}(\pi-\omega)
$$

我们只需列出满足 $\mu \geqslant \nu \geqslant 0$ 条件的矩阵元素 $d^j_{\nu\mu}(\omega)$

$$
\begin{aligned}
&d^0_{0,0}(\omega) = 1, && d^{1/2}_{1/2,1/2}(\omega) = c, && \\
&d^1_{1,1}(\omega) = c^2, && d^1_{0,1}(\omega) = \sqrt{2}cs, && d^1_{0,0}(\omega) = c^2 - s^2,\\
&d^{3/2}_{3/2,3/2}(\omega) = c^3, && d^{3/2}_{1/2,3/2}(\omega) = \sqrt{3}c^2 s, && d^{3/2}_{1/2,1/2}(\omega) = c^3 - 2cs^2,\\
&d^2_{2,2}(\omega) = c^4, && d^2_{1,2}(\omega) = 2c^3 s, && d^2_{1,1}(\omega) = c^4 - 3c^2 s^2,\\
&d^2_{0,2}(\omega) = \sqrt{6}c^2 s^2, && d^2_{0,1}(\omega) = \sqrt{6}\left(c^3 s - cs^3\right), && d^2_{0,0}(\omega) = c^4 - 4c^2 s^2 + s^4
\end{aligned}
$$

$$d^{5/2}_{5/2,5/2}(\omega) = c^5, \qquad d^{5/2}_{3/2,5/2}(\omega) = \sqrt{5}c^4 s,$$

$$d^{5/2}_{3/2,3/2}(\omega) = c^5 - 4c^3s^2, \qquad d^{5/2}_{1/2,5/2}(\omega) = \sqrt{10}c^3s^2,$$

$$d^{5/2}_{1/2,3/2}(\omega) = \sqrt{2}\left(2c^4s - 3c^2s^3\right), \qquad d^{5/2}_{1/2,1/2}(\omega) = c^5 - 6c^3s^2 + 3cs^4,$$

$$d^{3}_{3,3}(\omega) = c^6, \qquad d^{3}_{2,3}(\omega) = \sqrt{6}c^5 s,$$

$$d^{3}_{2,2}(\omega) = c^6 - 5c^4s^2, \qquad d^{3}_{1,3}(\omega) = \sqrt{15}c^4s^2,$$

$$d^{3}_{1,2}(\omega) = \sqrt{10}\left(c^5s - 2c^3s^3\right), \qquad d^{3}_{1,1}(\omega) = c^6 - 8c^4s^2 + 6c^2s^4,$$

$$d^{3}_{0,3}(\omega) = 2\sqrt{5}c^3s^3, \qquad d^{3}_{0,2}(\omega) = \sqrt{30}\left(c^4s^2 - c^2s^4\right),$$

$$d^{3}_{0,1}(\omega) = 2\sqrt{3}\left(c^5s - 3c^3s^3 + cs^5\right), \qquad d^{3}_{0,0}(\omega) = c^6 - 9c^4s^2 + 9c^2s^4 - s^6,$$

$$d^{7/2}_{7/2,7/2}(\omega) = c^7, \qquad d^{7/2}_{5/2,7/2}(\omega) = \sqrt{7}c^6 s,$$

$$d^{7/2}_{5/2,5/2}(\omega) = c^7 - 6c^5s^2, \qquad d^{7/2}_{3/2,7/2}(\omega) = \sqrt{21}c^5s^2,$$

$$d^{7/2}_{3/2,5/2}(\omega) = \sqrt{3}\left(2c^6s - 5c^4s^3\right), \qquad d^{7/2}_{3/2,3/2}(\omega) = c^7 - 10c^5s^2 + 10c^3s^4,$$

$$d^{7/2}_{1/2,7/2}(\omega) = \sqrt{35}c^4s^3, \qquad d^{7/2}_{1/2,5/2}(\omega) = \sqrt{5}\left(3c^5s^2 - 4c^3s^4\right),$$

$$d^{7/2}_{1/2,3/2}(\omega) = \sqrt{15}\left(c^6s - 4c^4s^3 + 2c^2s^5\right), \qquad d^{7/2}_{1/2,1/2}(\omega) = c^7 - 12c^5s^2 + 18c^3s^4 - 4cs^6,$$

$$d^{4}_{4,4}(\omega) = c^8, \qquad d^{4}_{3,4}(\omega) = 2\sqrt{2}c^7 s,$$

$$d^{4}_{3,3}(\omega) = c^8 - 7c^6s^2, \qquad d^{4}_{2,4}(\omega) = 2\sqrt{7}c^6s^2,$$

$$d^{4}_{2,3}(\omega) = \sqrt{14}\left(c^7s - 3c^5s^3\right), \qquad d^{4}_{2,2}(\omega) = c^8 - 12c^6s^2 + 15c^4s^4,$$

$$d^{4}_{1,4}(\omega) = 2\sqrt{14}c^5s^3, \qquad d^{4}_{1,3}(\omega) = \sqrt{7}\left(3c^6s^2 - 5c^4s^4\right),$$

$$d^{4}_{1,2}(\omega) = \sqrt{2}\left(3c^7s - 15c^5s^3 + 10c^3s^5\right), \qquad d^{4}_{1,1}(\omega) = c^8 - 15c^6s^2 + 30c^4s^4 - 5c^2s^6,$$

$$d^{4}_{0,4}(\omega) = \sqrt{70}c^4s^4, \qquad d^{4}_{0,3}(\omega) = 2\sqrt{35}\left(c^5s^3 - c^3s^5\right),$$

$$d^{4}_{0,2}(\omega) = \sqrt{10}\left(3c^6s^2 - 8c^4s^4 + 3c^2s^6\right),$$

$$d^{4}_{0,1}(\omega) = 2\sqrt{5}\left(c^7s - 6c^5s^3 + 6c^3s^5 - cs^7\right),$$

$$d^{4}_{0,0}(\omega) = c^8 - 16c^6s^2 + 36c^4s^4 - 16c^2s^6 + s^8$$

附录 10　球谐多项式

球函数 $\mathrm{Y}^{\ell}_{m}(\theta,\varphi)$ 乘上 r^{ℓ} 后是直角坐标的 ℓ 次齐次多项式, 称为球谐多项式. 为了符合通常习惯, 这里直角坐标写成 x, y 和 z, 而不取符号 x_1, x_2 和 x_3. 下面列出球谐多项式基本公式和若干具体形式 ($m=\ell$, $\ell-1$ 和 $\ell \leqslant 4$)

$$r^{\ell}\mathrm{Y}^{\ell}_{m}(\hat{\boldsymbol{r}}) = \left\{\frac{2\ell+1}{4\pi}\right\}^{1/2} r^{\ell}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}d^{\ell}_{m0}(\theta) \tag{A10.1}$$

$$r^\ell \mathrm{Y}_\ell^\ell(\hat{\boldsymbol{r}}) = \frac{(-1)^\ell}{2^{\ell+1}\ell!}\left\{\frac{(2\ell+1)!}{\pi}\right\}^{1/2}(x+\mathrm{i}y)^\ell \tag{A10.2}$$

$$r^\ell \mathrm{Y}_{\ell-1}^\ell(\hat{\boldsymbol{r}}) = \frac{(-1)^{\ell-1}}{2^\ell(\ell-1)!}\left\{\frac{(2\ell+1)!}{2\pi\ell}\right\}^{1/2}(x+\mathrm{i}y)^{\ell-1}z, \qquad \ell>0 \tag{A10.3}$$

$$\sqrt{4\pi}\mathrm{Y}_0^0 = 1.$$

$$\sqrt{\frac{4\pi}{3}}r\mathrm{Y}_0^1 = z.$$

$$\sqrt{\frac{8\pi}{15}}r^2\mathrm{Y}_{\pm1}^2 = \mp(x\pm\mathrm{i}y)z,$$

$$\sqrt{\frac{8\pi}{35}}r^3\mathrm{Y}_{\pm3}^3 = \mp\frac{1}{2\sqrt{2}}(x\pm\mathrm{i}y)^3,$$

$$\sqrt{\frac{8\pi}{35}}r^3\mathrm{Y}_{\pm1}^3 = \mp\frac{\sqrt{30}}{20}(x\pm\mathrm{i}y)\left(5z^2-r^2\right),$$

$$\sqrt{\frac{32\pi}{315}}r^4\mathrm{Y}_{\pm4}^4 = \frac{1}{4}(x\pm\mathrm{i}y)^4,$$

$$\sqrt{\frac{32\pi}{315}}r^4\mathrm{Y}_{\pm2}^4 = \frac{1}{2\sqrt{7}}(x\pm\mathrm{i}y)^2\left(7z^2-r^2\right),$$

$$\sqrt{\frac{32\pi}{315}}r^4\mathrm{Y}_{\pm1}^4 = \mp\frac{1}{\sqrt{14}}(x\pm\mathrm{i}y)z\left(7z^2-3r^2\right),$$

$$\sqrt{\frac{32\pi}{315}}r^4\mathrm{Y}_0^4 = \frac{1}{2\sqrt{70}}\left(35z^4-30r^2z^2+3r^4\right).$$

$$\sqrt{\frac{4\pi}{3}}r\mathrm{Y}_{\pm1}^1 = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}(x\pm\mathrm{i}y),$$

$$\sqrt{\frac{8\pi}{15}}r^2\mathrm{Y}_{\pm2}^2 = \frac{1}{2}(x\pm\mathrm{i}y)^2,$$

$$\sqrt{\frac{8\pi}{15}}r^2\mathrm{Y}_0^2 = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(3z^2-r^2\right).$$

$$\sqrt{\frac{8\pi}{35}}r^3\mathrm{Y}_{\pm2}^3 = \frac{\sqrt{3}}{2}(x\pm\mathrm{i}y)^2z,$$

$$\sqrt{\frac{8\pi}{35}}r^3\mathrm{Y}_0^3 = \frac{1}{\sqrt{10}}\left(5z^2-3r^2\right)z.$$

$$\sqrt{\frac{32\pi}{315}}r^4\mathrm{Y}_{\pm3}^4 = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}(x\pm\mathrm{i}y)^3z,$$

附录 11 量子力学中角动量矩阵形式的计算

在量子力学中，就根据角动量算符 L_a 的对易关系式 (4.112)，在 L^2 相同本征值的本征函数构成的有限维函数空间中，选取关于 L_a 的最小不变函数空间，取 L_3 对角化的表象，计算出生成元的矩阵形式式 (4.78)，称为角动量的矩阵形式. 现简单解释一下计算过程.

引入 $L_\pm = L_1 \pm \mathrm{i}L_2$，则

$$[L_3,\ L_\pm] = \pm L_\pm, \qquad [L_+,\ L_-] = 2L_3, \qquad \left[L^2,\ L_a\right] = 0,$$
$$L^2 = \sum_a L_a^2 = L_3^2 + L_3 + L_-L_+ = L_3^2 - L_3 + L_+L_-$$

若 $|m\rangle$ 是 L_3 的本征状态，本征值为 m，则 $L_\pm|m\rangle$ 也是 L_3 的本征状态，本征值为 $m\pm1$. 在 L^2 的相同本征值的简并本征函数空间中，因为简并度有限，则必能找到 L_3 最高本征值的本征状态，本征值记为 ℓ

$$L_3|\ell\rangle = \ell|\ell\rangle, \qquad L_+|\ell\rangle = 0$$

由此可求出 L^2 的本征值为 $\ell(\ell+1)$. 多次用 L_- 作用, 由于简并度有限, 次数足够多后必有

$$L_-^{n+1}|\ell\rangle = 0\ , \qquad L_-^m|\ell\rangle \neq 0\ , \qquad 0 \leqslant m \leqslant n$$

则

$$\begin{aligned} &L_3 L_-^n|\ell\rangle = (\ell - n)L_-^n|\ell\rangle, \\ &L^2 L_-^n|\ell\rangle = (\ell - n)(\ell - n - 1)L_-^n|\ell\rangle = \ell(\ell+1)L_-^n|\ell\rangle \end{aligned}$$

解得 n 的正根为 2ℓ, 故 ℓ 只能取整数或半奇数. 设

$$L_-|m\rangle = A_m|m-1\rangle\ , \qquad -\ell \leqslant m \leqslant \ell$$

其中, A_m 是待定常数, $A_{-\ell} = 0$, 其他 A_m 不为零. 现在来证明基 $|m\rangle$ 在 L_+ 作用下和 $|m+1\rangle$ 成比例, 就是说, 这个 $2\ell+1$ 维空间对角动量算符 L_a 是封闭的. 用数学归纳法, 若下式成立

$$L_+|n\rangle = B_{n+1}|n+1\rangle, \qquad m \leqslant n \leqslant \ell\ , \qquad B_{\ell+1} = 0$$

要证明它对 $n = m-1 \geqslant -\ell$ 也成立,
其中, B_{n+1} 是待定常数

$$\begin{aligned} &2m|m\rangle = 2L_3|m\rangle = [L_+,\ L_-]\,|m\rangle = A_m L_+|m-1\rangle - A_{m+1}B_{m+1}|m\rangle, \\ &L_+|m-1\rangle = (A_m)^{-1}\left(2m + A_{m+1}B_{m+1}\right)|m\rangle = B_m|m\rangle \end{aligned}$$

证完. 上式同时给出递推关系

$$\begin{aligned} A_{m+1}B_{m+1} &= A_m B_m - 2m = A_{m-1}B_{m-1} - 2m - 2(m-1) = \cdots \\ &= A_{-\ell}B_{m-(m+\ell)} - (m-\ell)(m+\ell+1) \\ &= (\ell+m+1)(\ell-m) = \left(\Gamma^\ell_{m+1}\right)^2 \end{aligned}$$

选择基的可乘因子, 使 $A_m = B_m = \Gamma^\ell_m$ 为正实数, 得式 (4.78).

附录 12　李代数的理想和李群的不变子李群

我们来简要说明李代数存在非平庸理想是李群存在非平庸不变子李群的充要条件.

设 H 是李群 G 的不变子李群, $A(\alpha)$ 是 H 的无穷小元素, 生成元记作 I_μ, R 是 G 的无穷小元素, 生成元记作 I_j. 根据不变子李群的性质, $RAR^{-1}A^{-1} = B$ 仍是 H

中的一个无穷小元素. 在群 G 的一个真实表示 $D(G)$ 中

$$D(R) = \mathbf{1} - \mathrm{i}\sum_{j=1}^{g} r_j I_j + \cdots , \qquad D(A) = \mathbf{1} - \mathrm{i}\sum_{\mu=1}^{h} \alpha_\mu I_\mu ,$$

$$\begin{aligned} D(R)D(A)D(R)^{-1}D(A)^{-1} &= \mathbf{1} - \sum_{j=1}^{g}\sum_{\mu=1}^{h} r_j\alpha_\mu [I_j,\ I_\mu] + \cdots \\ &= D(B) = \mathbf{1} - \mathrm{i}\sum_{\nu=1}^{h} \beta_\nu I_\nu \end{aligned}$$

这里我们并不关心 β_ν 具体等于多少, 而关心的是生成元 I_j 和 I_μ 取对易关系 (李代数中的乘积运算) 后, 仍属于李代数 $\mathcal{L}_H$, 即 $\mathcal{L}_H$ 是 $\mathcal{L}_G$ 的理想.

另一方面, 若 $\mathcal{L}_H$ 是 $\mathcal{L}_G$ 的理想, $A(\alpha)$ 是 H 的无穷小元素, R 是 G 的任意元素. 先假定群 G 存在指数映照, 即 R 可以表为生成元的矩阵指数函数. 利用第四章习题 1 的公式, 有

$$D(R) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}X}, \qquad D(A) = \mathbf{1} - \mathrm{i}\sum_{\mu=1}^{h} \alpha_\mu I_\mu , \qquad X \in \mathcal{L}_G, \qquad I_\mu \in \mathcal{L}_H,$$

$$D(R)D(A)D(R)^{-1} = \mathbf{1} - \mathrm{i}\sum_{\mu=1}^{h} \alpha_\mu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}[X,\ [X,\ \cdots\ [X,\ I_\mu]\cdots]]$$

根据假设 $\mathcal{L}_H$ 是 $\mathcal{L}_G$ 的理想, 有

$$[X,\ [X,\ \cdots\ [X,\ I_\mu]\cdots]] \in \mathcal{L}_H$$

因而 $D(R)D(A)D(R)^{-1} \in H$. 对一般情况, 根据李氏第一定理, R 可以表为生成元 X 的矩阵指数函数的乘积, 上述证明仍成立.

附录 13　SU(2) 群的克莱布施–戈登系数

先推导计算中常用的有关组合数的求和公式, 这些公式可由下面二项式定理来证明

$$\begin{aligned} (1+x)^a &= \sum_{n=0}^{a} x^n \begin{pmatrix} a \\ n \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} a \\ n \end{pmatrix} = \frac{a!}{n!(a-n)!}, \\ (1+x)^{-b} &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n x^n \begin{pmatrix} b+n-1 \\ n \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{A13.1}$$

其实这里不用太注意求和指标的取值范围, 因为一旦它超出此范围, 分母会出现负整数的阶乘, 从而使该项为零. 分别用两种不同方式计算下面二项式, 再做求和指

标替换, 就可证明三个恒等式. 首先

$$(1+x)^{a+b}=\sum_m x^m\begin{pmatrix}a+b\\m\end{pmatrix}=(1+x)^a(1+x)^b$$
$$=\sum_n x^n\begin{pmatrix}a\\n\end{pmatrix}\sum_\ell x^\ell\begin{pmatrix}b\\\ell\end{pmatrix}=\sum_m x^m\sum_n\begin{pmatrix}a\\n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}b\\m-n\end{pmatrix}$$

得

$$\begin{aligned}&\sum_p\begin{pmatrix}u\\p\end{pmatrix}\begin{pmatrix}v\\r-p\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}u+v\\r\end{pmatrix},\\&\sum_p\{p!(v-r+p)!(u-p)!(r-p)!\}^{-1}=\frac{(u+v)!}{u!v!r!(u+v-r)!}\end{aligned}\tag{A13.2}$$

其次

$$(1+x)^{a-b}=\sum_m(-1)^m x^m\begin{pmatrix}b-a+m-1\\m\end{pmatrix}$$
$$=(1+x)^a(1+x)^{-b}=\sum_n x^n\begin{pmatrix}a\\n\end{pmatrix}\sum_\ell(-1)^\ell x^\ell\begin{pmatrix}b+\ell-1\\\ell\end{pmatrix}$$
$$=\sum_m(-1)^m x^m\sum_n(-1)^n\begin{pmatrix}a\\n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}b+m-n-1\\m-n\end{pmatrix}$$

得

$$\begin{aligned}&\sum_p(-1)^p\begin{pmatrix}u\\p\end{pmatrix}\begin{pmatrix}v-p\\r-p\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}v-u\\r\end{pmatrix},\\&\sum_p\frac{(-1)^p(v-p)!}{p!(u-p)!(r-p)!}=\frac{(v-u)!(v-r)!}{u!r!(v-u-r)!}\end{aligned}\tag{A13.3}$$

最后

$$\begin{aligned}(1+x)^{-a-b}&=\sum_m(-1)^m x^m\begin{pmatrix}a+b+m-1\\m\end{pmatrix}\\&=(1+x)^{-a}(1+x)^{-b}=\sum_n(-1)^n x^n\begin{pmatrix}a+n-1\\n\end{pmatrix}\sum_\ell(-1)^\ell x^\ell\begin{pmatrix}b+\ell-1\\\ell\end{pmatrix}\\&=\sum_m(-1)^m x^m\sum_n\begin{pmatrix}a+n-1\\n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}b+m-n-1\\m-n\end{pmatrix}\end{aligned}$$

得

$$\sum_p \begin{pmatrix} u+p-1 \\ p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v+r-p-1 \\ r-p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u+v+r-1 \\ r \end{pmatrix},$$
$$\sum_p \frac{(u+p-1)!(v+r-p-1)!}{p!(r-p)!} = \frac{(u+v+r-1)!(u-1)!(v-1)!}{r!(u+v-1)!} \tag{A13.4}$$

现在介绍由递推关系式 (4.137) 计算 CG 系数的方法. 取式 (4.137) 的上面符号, 且 $M = J$, 则等式右面项为零. 逐次取 $\mu = j,\ j-1,\ \cdots$, 可把 $C^{jk}_{\mu(J-\mu)JJ}$ 用 $C^{jk}_{j(J-j)JJ}$ 表出

$$C^{jk}_{\mu(J-\mu)JJ} = (-1)^{j-\mu}\left\{\frac{(J+k-\mu)!(j+k-J)!(j+\mu)!}{(J+k-j)!(k-J+\mu)!(j-\mu)!(2j)!}\right\}^{1/2} C^{jk}_{j(J-j)JJ} \tag{A13.5}$$

由于 $C^{jk}_{j(J-j)JJ}$ 是正实数, 用归一化条件 (4.138) 和式 (A13.4) 可算得

$$C^{jk}_{j(J-j)JJ} = \left\{\frac{(2j)!(2J+1)!}{(J+j-k)!(J+j+k+1)!}\right\}^{1/2} \tag{A13.6}$$

$$\begin{aligned} C^{jk}_{\mu(J-\mu)JJ} &= (-1)^{j-\mu} \\ &\times\left\{\frac{(2J+1)!(j+k-J)!(J+k-\mu)!(j+\mu)!}{(J+k-j)!(J+j-k)!(J+j+k+1)!(k-J+\mu)!(j-\mu)!}\right\}^{1/2} \end{aligned} \tag{A13.7}$$

最后, $J-M$ 次引用递推关系 (4.137)(下面符号), 可把 $C^{jk}_{\mu(M-\mu)JM}$ 中的磁量子数 M 升至 J. 每用一次递推关系, 项数增加一倍, 总共有 2^{J-M} 项, 每一项都包含 $C^{jk}_{m(J-m)JJ}$, 但 m 值不同. m 值相同的项系数都相同, 这样的项数等于 $J-M$ 个客体中取 $m-\mu$ 个客体的组合数. 因此得

$$\begin{aligned} C^{jk}_{\mu(M-\mu)JM} &= \sum_m C^{jk}_{m(M-m)JJ}\left\{\frac{(J-M)!}{(m-\mu)!(J-M+\mu-m)!}\right\} \\ &\quad\times\left\{\frac{(j-\mu)!(k-M+\mu)!(J+M)!(J+k-m)!(j+m)!}{(j+\mu)!(k+M-\mu)!(J-M)!(j-m)!(k-J+m)!(2J)!}\right\}^{1/2} \\ &= \left\{\frac{(2J+1)(j+k-J)!(J+M)!(J-M)!(j-\mu)!(k-M+\mu)!}{(J+j+k+1)!(J+j-k)!(J-j+k)!(j+\mu)!(k+M-\mu)!}\right\}^{1/2} \\ &\quad\times\sum_m \frac{(-1)^{j-m}(J+k-m)!(j+m)!}{(j-m)!(J-M+\mu-m)!(m-\mu)!(m+k-J)!} \end{aligned}$$

将求和指标 m 换成 $n=m-\mu$, 得克莱布施 - 戈登系数的拉卡形式

$$\begin{aligned}
&C^{jk}_{\mu(M-\mu)JM}\\
&=\left\{\frac{(2J+1)(j+k-J)!(J+M)!(J-M)!(j-\mu)!(k-M+\mu)!}{(J+j+k+1)!(J+j-k)!(J-j+k)!(j+\mu)!(k+M-\mu)!}\right\}^{1/2}\\
&\times\sum_n\frac{(-1)^{n+j-\mu}(J+k-\mu-n)!(j+\mu+n)!}{(j-\mu-n)!(J-M-n)!n!(n+\mu+k-J)!}\\
&n\text{ 取}\quad \max\left\{\begin{array}{c}0\\ J-k-\mu\end{array}\right\},\ \cdots,\ \min\left\{\begin{array}{c}j-\mu\\ J-M\end{array}\right\}
\end{aligned}\tag{A13.8}$$

注意, 因子 $(2J+1)^{1/2}$ 是没有阶乘号的.

通过下列求和指标替换步骤, 可把克莱布施 - 戈登系数化为更对称的形式:

(1) 用式 (A13.2), 取 $u=k+M-\mu$, $v=J-M-n$, $r=J-j+k$, 和 $p=s$, 得

$$\begin{aligned}
&\frac{(k+J-\mu-n)!}{(k+M-\mu)!(J-M-n)!(J-j+k)!(j-\mu-n)!}\\
&\qquad=\sum_s\{(s)!(k+M-\mu-s)!(J-j+k-s)!(j-k-M-n+s)!\}^{-1}
\end{aligned}$$

(2) 把求和指标 n 换成 $t=j-k-M+s-n$, 再用式 (A13.3), 取 $v=2j-k-M+\mu+s$, $u=j-J-M+\mu+s$, $r=j-k-M+s$ 和 $p=t$, 得

$$\begin{aligned}
&\sum_n\frac{(-1)^{-n+j-\mu}(j+\mu+n)!}{(n)!(k-J+\mu+n)!(j-k-M-n+s)!}\\
&\quad=\sum_t\frac{(-1)^{k+M-\mu-s+t}(2j-k-M+\mu+s-t)!}{(t)!(j-J-M+\mu+s-t)!(j-k-M+s-t)!}\\
&\quad=\frac{(-1)^{k+M-\mu-s}(j-k+J)!(j+\mu)!}{(j-J-M+\mu+s)!(j-k-M+s)!(J+M-s)!}
\end{aligned}$$

(3) 把求和指标 s 换成 $n=k+M-\mu-s$, 得

$$\begin{aligned}
C^{jk}_{\mu(M-\mu)JM}\ =\ &(2J+1)^{1/2}\Delta(j,k,J)\{(j+\mu)!(j-\mu)!\\
&\times(k+M-\mu)!(k-M+\mu)!(J+M)!(J-M)!\}^{1/2}\\
&\times\sum_n(-1)^n\ \{(n)!(J-j-M+\mu+n)!(J-k+\mu+n)!\\
&\times(j-\mu-n)!(k+M-\mu-n)!(j+k-J-n)!\}^{-1}
\end{aligned}$$

$$n\text{ 取}\quad \max\left\{\begin{array}{c}0\\ j+M-\mu-J\\ k-\mu-J\end{array}\right\},\cdots,\ \min\left\{\begin{array}{c}j-\mu\\ k+M-\mu\\ j+k-J\end{array}\right\}\tag{A13.9}$$

其中, $|\mu| \leqslant j$, $|M-\mu| \leqslant k$, $|M| \leqslant J$, $|j-k| \leqslant J \leqslant j+k$, 和

$$\Delta(a,b,c) = \left\{\frac{(a+b-c)!(b+c-a)!(c+a-b)!}{(a+b+c+1)!}\right\}^{1/2} \tag{A13.10}$$

这公式称为克莱布施 - 戈登系数的范德瓦登 (Van der Waerden) 形式.

现在介绍由式 (4.132) 直接计算 CG 系数的方法. 把以欧拉角作为参数的 $D^j(\alpha, \beta, \gamma)$ 函数式 (4.73) 代入, 由于式 (4.136), 等式两边与 α 和 γ 角有关的指数因子正好消去. 将相似变换矩阵移到等式右面, 得

$$d^j_{\mu\rho}(\beta)d^k_{\nu\lambda}(\beta) = \sum_J C^{jk}_{\mu\nu J(\mu+\nu)} d^J_{(\mu+\nu)(\rho+\lambda)}(\beta) C^{jk}_{\rho\lambda J(\rho+\lambda)} \tag{A13.11}$$

利用 d^j 函数的正交关系式 (4.77) 得

$$C^{jk}_{\mu\nu J(\mu+\nu)} C^{jk}_{\rho\lambda J(\rho+\lambda)} = \frac{2J+1}{2}\int_0^\pi \mathrm{d}\beta\ \sin\beta d^J_{(\mu+\nu)(\rho+\lambda)}(\beta) d^j_{\mu\rho}(\beta) d^k_{\nu\lambda}(\beta) \tag{A13.12}$$

取 $\rho = j$, $\lambda = -k$, 以 d^j 的具体形式式 (4.72) 代入, 并利用积分公式

$$\frac{1}{2}\int_0^\pi \mathrm{d}\beta\ [\cos(\beta/2)]^{2a}[\sin(\beta/2)]^{2b} = \frac{a!b!}{(a+b+1)!} \tag{A13.13}$$

得

$$\begin{aligned} C^{jk}_{\mu\nu J(\mu+\nu)} C^{jk}_{j(-k)J(j-k)} &= \frac{(2J+1)\left\{(2j)!(2k)!\right\}^{1/2}}{(J+j+k+1)!} \\ &\times \left\{\frac{(J+j-k)!(J-j+k)!(J+\mu+\nu)!(J-\mu-\nu)!}{(j+\mu)!(j-\mu)!(k+\nu)!(k-\nu)!}\right\}^{1/2} \\ &\times \sum_n \frac{(-1)^{n+k+\nu}(J+k+\mu-n)!(n+j-\mu)!}{(J-j+k-n)!(J+\mu+\nu-n)!n!(n+j-k-\mu-\nu)!} \end{aligned} \tag{A13.14}$$

先计算 $C^{jk}_{j(-k)J(j-k)}$, 取 $\mu = j$ 和 $\nu = -k$, 得

$$\begin{aligned} \left(C^{jk}_{j(-k)J(j-k)}\right)^2 &= \frac{(2J+1)(2k)!(J+j-k)!}{(J+j+k+1)!} \\ &\times \sum_n (-1)^n \begin{pmatrix} J-j+k \\ n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J+j+k-n \\ J+j-k-n \end{pmatrix} \end{aligned}$$

注意它是正实数, 利用式 (A13.3), 取 $u = J-j+k$, $v = J+j+k$, $r = J+j-k$ 和 $p = n$, 得

$$C^{jk}_{j(-k)J(j-k)} = \left\{\frac{(2J+1)(2j)!(2k)!}{(J+j+k+1)!(j+k-J)!}\right\}^{1/2} \tag{A13.15}$$

再代入式 (A13.14) 得

$$
\begin{aligned}
C^{jk}_{\mu\nu J(\mu+\nu)} &= \left\{ \frac{(j+k-J)!(J-j+k)!(J+j-k)!}{(J+j+k+1)!} \right\}^{1/2} \\
&\times \left\{ \frac{(2J+1)(J+\mu+\nu)!(J-\mu-\nu)!}{(j+\mu)!(j-\mu)!(k+\nu)!(k-\nu)!} \right\}^{1/2} \\
&\times \sum_n \frac{(-1)^{n+k+\nu}(J+k+\mu-n)!(n+j-\mu)!}{(J-j+k-n)!(J+\mu+\nu-n)!n!(n+j-k-\mu-\nu)!}
\end{aligned}
$$

将对 n 求和换成对 $m=n-k-\nu$ 求和, 再把求和指标 m 重新记作 n, 得克莱布施 - 戈登系数的维格纳 (Wigner) 形式

$$
\begin{aligned}
C^{jk}_{\mu\nu J(\mu+\nu)} &= \Delta(j,k,J) \left\{ \frac{(2J+1)(J+\mu+\nu)!(J-\mu-\nu)!}{(j+\mu)!(j-\mu)!(k+\nu)!(k-\nu)!} \right\}^{1/2} \\
&\times \sum_n \frac{(-1)^n (J+\mu-\nu-n)!(n+j+k-\mu+\nu)!}{(J-j-\nu-n)!(J-k+\mu-n)!(n+k+\nu)!(n+j-\mu)!} \\
&n\ 取\ \ \max\begin{pmatrix} -k-\nu \\ -j+\mu \end{pmatrix}, \cdots, \min\begin{pmatrix} J-j-\nu \\ J-k+\mu \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{A13.16}
$$

下面用展开式 (4.147) 的方式列出若干克莱布施 - 戈登系数, 但波函数采用狄拉克符号, 即把 $\Psi^J_M(x^{(1)}x^{(2)})$ 记作 $||J,M\rangle$, 把 $\psi^j_\mu(x^{(1)})\psi^k_\nu(x^{(2)})$ 记作 $|j,\mu\rangle|k,\nu\rangle$

$$
||J,M\rangle = \sum_\mu C^{jk}_{\mu(M-\mu)JM}\ |j,\mu\rangle|k,(M-\mu)\rangle \tag{A13.17}
$$

列出的克莱布施 - 戈登系数有

$$
\begin{aligned}
||(j+k),(j+k)\rangle &= |j,j\rangle|k,k\rangle, \\
||(j+k),(j+k-1)\rangle &= \left(\frac{k}{j+k}\right)^{1/2} |j,j\rangle|k,(k-1)\rangle \\
&\quad + \left(\frac{j}{j+k}\right)^{1/2} |j,(j-1)\rangle|k,k\rangle, \\
||(j+k),(j+k-2)\rangle &= \left(\frac{k(2k-1)}{(j+k)(2j+2k-1)}\right)^{1/2} |j,j\rangle|k,(k-2)\rangle \\
&\quad + 2\left(\frac{jk}{(j+k)(2j+2k-1)}\right)^{1/2} |j,(j-1)\rangle|k,(k-1)\rangle \\
&\quad + \left(\frac{j(2j-1)}{(j+k)(2j+2k-1)}\right)^{1/2} |j,(j-2)\rangle|k,k\rangle,
\end{aligned}
$$

$$
||(j+k),M\rangle = \sum_{\mu} \left[\frac{(2j)!(2k)!(j+k+M)!(j+k-M)!}{(2j+2k)!(j+\mu)!(j-\mu)!(k+M-\mu)!(k-M+\mu)!}\right]^{1/2} \times|j,\mu\rangle|k,(M-\mu)\rangle \tag{A13.18}
$$

这些式子都可用降算符 L_- 多次作用在第一式两边得到, 但要注意对乘积波函数, 降算符要分别作用到两个波函数上, 然后相加, 即降算符为

$$
L_- \times \mathbf{1} + \mathbf{1} \times L_- \tag{A13.19}
$$

利用升算符 L_+ 作用为零的条件, 或用与上述展开式正交的条件, 再考虑相因子的规定, 可计算不同 J 的最高磁量子数状态 $(M=J)$ 的展开式, 它是式 (A13.7) 的另一表达方式

$$
\begin{aligned}
||(j+k-1),(j+k-1)\rangle &= \left(\frac{j}{j+k}\right)^{1/2} |j,j\rangle|k,(k-1)\rangle \\
&\quad - \left(\frac{k}{j+k}\right)^{1/2} |j,(j-1)\rangle|k,k\rangle, \\
||(j+k-2),(j+k-2)\rangle &= \left(\frac{2j(2j-1)}{(2j+2k-1)(2j+2k-2)}\right)^{1/2} |j,j\rangle|k,(k-2)\rangle \\
&\quad - \left(\frac{2(2j-1)(2k-1)}{(2j+2k-1)(2j+2k-2)}\right)^{1/2} |j,(j-1)\rangle|k,(k-1)\rangle \\
&\quad + \left(\frac{2k(2k-1)}{(2j+2k-1)(2j+2k-2)}\right)^{1/2} |j,(j-2)\rangle|k,k\rangle, \\
||J,J\rangle &= \sum_{\mu} (-1)^{j-\mu} \\
&\quad \times \left\{\frac{(2J+1)!(j+k-J)!(J+k-\mu)!(j+\mu)!}{(J+k-j)!(J+j-k)!(J+j+k+1)!(k-J+\mu)!(j-\mu)!}\right\}^{1/2} \\
&\quad \times|j,\mu\rangle|k,(J-\mu)\rangle
\end{aligned} \tag{A13.20}
$$

然后再用降算符式 (A13.19) 作用, 可计算其他状态的展开式. 这也是计算克莱布施 - 戈登系数的一种重要方法, 将在第七章做详细讨论.

当 $k=1/2$ 和 $k=1$ 时, 有

$$
\begin{aligned}
C^{j\frac{1}{2}}_{(M-\frac{1}{2})\frac{1}{2}(j+\frac{1}{2})M} &= C^{j\frac{1}{2}}_{(M+\frac{1}{2})(-\frac{1}{2})(j-\frac{1}{2})M} = \left\{\frac{j+M+1/2}{2j+1}\right\}^{1/2}, \\
C^{j\frac{1}{2}}_{(M+\frac{1}{2})(-\frac{1}{2})(j+\frac{1}{2})M} &= -C^{j\frac{1}{2}}_{(M-\frac{1}{2})\frac{1}{2}(j-\frac{1}{2})M} = \left\{\frac{j-M+1/2}{2j+1}\right\}^{1/2},
\end{aligned} \tag{A13.21}
$$

$$
\begin{aligned}
C^{j1}_{(M\mp1)(\pm1)(j+1)M} &= \left\{\frac{(j\pm M)(j\pm M+1)}{2(2j+1)(j+1)}\right\}^{1/2}, \\
C^{j1}_{(M\mp1)(\pm1)jM} &= \mp\left\{\frac{(j\pm M)(j\mp M+1)}{2j(j+1)}\right\}^{1/2}, \\
C^{j1}_{(M\mp1)(\pm1)(j-1)M} &= \left\{\frac{(j\mp M)(j\mp M+1)}{2j(2j+1)}\right\}^{1/2}, \\
C^{j1}_{M0(j+1)M} &= \left\{\frac{(j-M+1)(j+M+1)}{(2j+1)(j+1)}\right\}^{1/2}, \\
C^{j1}_{M0jM} &= \frac{M}{\{j(j+1)\}^{1/2}}, \qquad C^{j1}_{M0(j-1)M} = -\left\{\frac{(j-M)(j+M)}{j(2j+1)}\right\}^{1/2}
\end{aligned}
\tag{A13.22}
$$

下面再列出部分 CG 系数值

$$
C^{j0}_{\mu0j\mu} = 1\,, \qquad C^{jj}_{\mu(-\mu)00} = \begin{pmatrix} j & j & 0 \\ \mu & -\mu & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j-\mu}}{(2j+1)^{1/2}} \tag{A13.23}
$$

$$
\sqrt{2}C^{11}_{\mu\nu1(\mu+\nu)} = \begin{cases} 1, & \text{当}\ \mu>\nu \\ 0, & \text{当}\ \mu=\nu \\ -1, & \text{当}\ \mu<\nu \end{cases} \tag{A13.24}
$$

$$
C^{jk}_{j(-k)(j-k)(j-k)} = (-1)^{2k}C^{jk}_{(-j)k(j-k)(k-j)} = \frac{2(j-k)+1}{2j+1}\,, \qquad j \geqslant k \tag{A13.25}
$$

$$
\begin{aligned}
C^{jk}_{j(M-j)JM} &= C^{kj}_{(j-M)(-j)J(-M)} \\
&= \left\{\frac{(2J+1)(2j)!(J+k-j)!(j+k-M)!(J+M)!}{(j+k-J)!(J+j-k)!(J+j+k+1)!(k-j+M)!(J-M)!}\right\}^{1/2}
\end{aligned}
\tag{A13.26}
$$

$$
C^{\ell_1\ell_2}_{00L0} = 0\,, \quad \text{当}\ L-\ell_1-\ell_2 = \text{奇数} \tag{A13.27}
$$

式 (A13.26) 反映了两子系统的宇称乘积必须等于复合系统的宇称 [见式 (4.152)].

附录 14 拉卡系数的计算

现在我们来用求和公式 (A13.2)~(A13.4), 把式 (4.159) 定义的拉卡系数具体计算出来. 计算中取 $M = J$, 并作符号简化

$$
\begin{aligned}
&a=j\,,\quad b=k\,,\quad c=J\,,\quad d=\ell\,,\quad e=J_{12}\,,\quad f=J_{23}, \\
&\alpha=J-\nu-\rho=\mu\,,\quad \gamma=J-\rho=\mu+\nu
\end{aligned}
$$

把式 (A13.7) 和式 (4.141) 的克莱布施–戈登系数代入式 (4.159), 得

$$\begin{aligned}
&W[abcd;ef] \\
&= \frac{(-1)^{a-b+c+d}\Delta(a,b,e)\Delta(e,d,c)\Delta(b,d,f)\Delta(a,f,c)(2c+1)!}{(c+d-e)!(c-d+e)!(c+a-f)!(c-a+f)!} \\
&\quad\times\sum_{\alpha\gamma tn}(-1)^{t+n}(a+\alpha)!(c+f-\alpha)!(e+\gamma)!(c+d-\gamma)! \\
&\quad\times(b+\alpha-\gamma)!(b-\alpha+\gamma)!\{t!(a-b+e-t)!n! \\
&\quad\times(-b+d+f-n)!(a+\alpha-t)!(-a+b-\gamma+t)! \\
&\quad\times(c+d-\gamma-n)!(b-c-d+\alpha+n)!(e+\gamma-t)! \\
&\quad\times(b-e-\alpha+t)!(c+f-\alpha-n)!(b-c-f+\gamma+n)!\}^{-1}
\end{aligned}$$

(1) 用式 (A13.2), 取 $u=-a+b-\gamma+t$, $v=a+\alpha-t$, $r=c+d-\gamma-n$ 和 $p=m-e-\gamma$, 得

$$\begin{aligned}
&\frac{(b+\alpha-\gamma)!}{(a+\alpha-t)!(-a+b-\gamma+t)!(c+d-\gamma-n)!(b-c-d+\alpha+n)!} \\
&\quad=\sum_m\{(m-e-\gamma)!(-a+b+e-m+t)!(c+d+e-n-m)! \\
&\quad\times(a-c-d-e+\alpha-t+n+m)!\}^{-1}
\end{aligned}$$

(2) 用式 (4.147), 取 $u=b-e-\alpha+t$, $v=e+\gamma-t$, $r=c+f-\alpha-n$ 和 $p=c+f-\alpha-n-m+t+w$, 得

$$\begin{aligned}
&\frac{(b-\alpha+\gamma)!}{(e+\gamma-t)!(b-e-\alpha+t)!(c+f-\alpha-n)!(b-c-f+\gamma+n)!} \\
&\quad=\sum_w\{(c+f-\alpha-n-m+t+w)!(b-c-e-f+n+m-w)! \\
&\quad\times(m-t-w)!(e+\gamma-m+w)!\}^{-1}
\end{aligned}$$

(3) 按式 (A13.4) 对 α 求和, 取 $u=n+m-t-w+1$, $v=c+d+e+t-n-m+1$, $r=a-d-e+f+w$ 和 $p=c+f-\alpha-n-m+t+w$, 得

$$\begin{aligned}
&\sum_\alpha\frac{(a+\alpha)!(c+f-\alpha)!}{(a-c-d-e+\alpha-t+n+m)!(c+f-\alpha-n-m+t+w)!} \\
&\quad=\frac{(a+c+f+1)!(n+m-t-w)!(c+d+e+t-n-m)!}{(a-d-e+f+w)!(c+d+e-w+1)!}
\end{aligned}$$

(4) 用式 (A13.2), 取 $u=a-b+e-t$, $v=-a+b-e+n+m-w$, $r=n$ 和

$p=j$, 得

$$\frac{(n+m-t-w)!}{(m-w-t)!(a-b+e-t)!(n)!}$$
$$=\sum_{j}\frac{(-a+b-e+n+m-w)!}{j!(a-b+e-t-j)!(-a+b-e+m-w+j)!(n-j)!}$$

(5) 用式 (A13.2), 取 $u=-b+d+f-n$, $v=b+c+e-f+t-m$, $r=t$ 和 $p=k$, 得

$$\frac{(c+d+e+t-n-m)!}{(-b+d+f-n)!t!(c+d+e-n-m)!}$$
$$=\sum_{k}\frac{(b+c+e-f+t-m)!}{k!(-b+d+f-n-k)!(t-k)!(b+c+e-f-m+k)!}$$

现在我们算得

$$\begin{aligned}
&W[abcd;ef]\\
&=\frac{(-1)^{a-b+c+d}\Delta(a,b,e)\Delta(e,d,c)\Delta(b,d,f)\Delta(a,f,c)(2c+1)!}{(c+d-e)!(c-d+e)!(c+a-f)!(c-a+f)!}\\
&\quad\times(a+c+f+1)!\sum_{\gamma}(e+\gamma)!(c+d-\gamma)!\sum_{j}\{(j)!\}^{-1}\\
&\quad\times\sum_{k}\{(k)!\}^{-1}\sum_{m}\{(b+c+e-f+k-m)!(-e+m-\gamma)!\}^{-1}\\
&\quad\times\sum_{w}\{(a-d-e+f+w)!(e+c+d-w+1)!\\
&\quad\times(-a+b-e-m-w+j)!(e+\gamma-m+w)!\}^{-1}\\
&\quad\times\sum_{n}(-1)^{n}(-a+b-e+m+n-w)!\\
&\quad\times\{(b-c-e-f+m+n-w)!(n-j)!(-b+d+f-k+n)!\}^{-1}\\
&\quad\times\sum_{t}(-1)^{t}\{(-a+b+e-m+t)!(a-b+e-t-j)!(t-k)!\}^{-1}
\end{aligned}$$

(6) 按式 (A13.3) 对 t 求和, 取 $u=2e-j-m$, $v=a+c+2e-f-j-m$, $r=a-b+e-j-k$ 和 $p=a-b+e-j-t$, 得

$$\sum_{t}\frac{(-1)^{t}(b+c+e+t-f-m)!}{(-a+b+e-m+t)!(a-b+e-j-t)!(t-k)!}$$
$$=\frac{(-1)^{-a+b-e+j}(a+c-f)!(b+c+e-f+k-m)!}{(2e-j-m)!(a-b+e-j-k)!(b+c-e-f+j+k)!}$$

(7) 按式 (A13.3) 对 n 求和, 取 $u=-b+d+f-j-k$, $v=-a+d-e+f-k+m-w$, $r=-c+d-e-k+m-w$ 和 $p=-b+d+f-k-n$, 得

$$\sum_n \frac{(-1)^n(-a+b-e+m+n-w)!}{(b-c-e-f+m+n-w)!(n-j)!(-b+d+f-k-n)!}$$
$$= \frac{(-1)^{b-d-f+k}(-a+b-e+j+m-w)!(-a+c+f)!}{(-b+d+f-j-k)!(-c+d-e-k+m-w)!}$$
$$\times \{(-a+b+c-d+j+k)!\}^{-1}$$

(8) 按式 (A13.2) 对 w 求和, 取 $u=-c+d-k+\gamma$, $v=a+c+f+1$, $r=c+d+2e-m+\gamma+1$ 和 $p=e-m+w+\gamma$, 得

$$\sum_w \{(a-d-e+f+w)!(c+d+e-w+1)!$$
$$\times (e-m+w+\gamma)!(-c+d-e-k+m-w)!\}^{-1}$$
$$=(a+d+f-k+\gamma+1)!\{(-c+d-k+\gamma)!(a+c+f+1)!$$
$$\times (c+d+2e-m+\gamma+1)!(a-c-2e+f-k+m)!\}^{-1}$$

(9) 按式 (A13.2) 对 m 求和, 取 $u=e-j-\gamma$, $v=a+d+f-k+\gamma+1$, $r=c+d+e+1$ 和 $p=-e+m-\gamma$, 得

$$\sum_m \{(-e+m-\gamma)!(c+d+2e-m+\gamma+1)!$$
$$\times (a-c-2e+f-k+m)!(2e-j-m)!\}^{-1}$$
$$=(a+d+e+f-j-k+1)!\{(e-j-\gamma)!(a+d+f-k+\gamma+1)!$$
$$\times(c+d+e+1)!(a-c+f-j-k)!\}^{-1}$$

做替换 $n=j+k$, 得

$$W[abcd;ef]$$
$$=\frac{(-1)^{b+c-e-f}\Delta(a,b,e)\Delta(e,d,c)\Delta(a,f,c)\Delta(b,d,f)(2c+1)!}{(c+e-d)!(c-e+d)!(c+d+e+1)!}$$
$$\times\sum_n(-1)^n(a+d+e+f-n+1)!\{(a-b+e-n)!(b+c-e-f+n)!$$
$$\times (a-c+f-n)!(-b+d+f-n)!(-a+b+c-d+n)!\}^{-1}\sum_\gamma \{(e+\gamma)!$$
$$\times (c+d-\gamma)!\}\sum_k \{(n-k)!(k)!(-c+d+\gamma-k)!(e-\gamma-n+k)!\}^{-1}$$

(10) 按式 (A13.2) 对 k 求和, 取 $u=n$, $v=-c+d+e-n$, $r=-c+d+\gamma$ 和 $p=k$, 得

$$\sum_k \{(n-k)!(k)!(-c+d+\gamma-k)!(e-\gamma-n+k)!\}^{-1}$$
$$=\frac{(-c+d+e)!}{n!(-c+d+e-n)!(-c+d+\gamma)!(e-\gamma)!}$$

(11) 按式 (A13.4) 对 γ 求和, 取 $u=c-d+e+1$, $v=c+d-e+1$, $r=-c+d+e$ 和 $p=-c+d+\gamma$, 得

$$\sum_{\gamma}\frac{(e+\gamma)!(c+d-\gamma)!}{(-c+d+\gamma)!(e-\gamma)!}=\frac{(c+d+e+1)!(c-d+e)!(c+d-e)!}{(-c+d+e)!(2c+1)!}$$

由此得

$$\begin{aligned}&W[abcd;ef]\\&=(-1)^{b+c-e-f}\Delta(a,b,e)\Delta(e,d,c)\Delta(b,d,f)\Delta(a,f,c)\\&\quad\times\sum_{n}(-1)^{n}(a+d+e+f-n+1)!\{n!(b+c-e-f+n)!\\&\quad\times(-a+b+c-d+n)!(a-b+e-n)!(-c+d+e-n)!\\&\quad\times(-b+d+f-n)!(a-c+f-n)!\}^{-1}\end{aligned}$$

最后做求和指标替换, 得式 (4.162).

下面列出若干 $6j$ 符号, 其中指标 d 取较小的值 0, 1/2 或 1.

$$\begin{Bmatrix}a & b & c\\ 0 & c & b\end{Bmatrix}=\frac{(-1)^{a+b+c}}{\{(2b+1)(2c+1)\}^{1/2}},$$

$$\begin{Bmatrix}a & b & c\\ \frac{1}{2} & c-\frac{1}{2} & b-\frac{1}{2}\end{Bmatrix}=(-1)^{a+b+c}\left\{\frac{(a+b+c+1)(-a+b+c)}{(2b)(2b+1)(2c)(2c+1)}\right\}^{1/2},$$

$$\begin{Bmatrix}a & b & c\\ \frac{1}{2} & c-\frac{1}{2} & b+\frac{1}{2}\end{Bmatrix}=(-1)^{a+b+c}\left\{\frac{(a-b+c)(a+b-c+1)}{(2b+1)(2b+2)(2c)(2c+1)}\right\}^{1/2},$$

$$\begin{aligned}&\begin{Bmatrix}a & b & c\\ 1 & c-1 & b-1\end{Bmatrix}=(-1)^{a+b+c}\\&\quad\times\left\{\frac{(a+b+c+1)(a+b+c)(-a+b+c)(-a+b+c-1)}{(2b-1)(2b)(2b+1)(2c-1)(2c)(2c+1)}\right\}^{1/2},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&\begin{Bmatrix}a & b & c\\ 1 & c-1 & b+1\end{Bmatrix}=(-1)^{a+b+c}\\&\quad\times\left\{\frac{(a-b+c-1)(a-b+c)(a+b-c+1)(a+b-c+2)}{(2b)(2b+1)(2b+2)(2c-1)(2c)(2c+1)}\right\}^{1/2},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&\begin{Bmatrix}a & b & c\\ 1 & c-1 & b\end{Bmatrix}=(-1)^{a+b+c}\\&\quad\times\left\{\frac{(a+b+c+1)(a+b-c+1)(a-b+c)(-a+b+c)}{2b(2b+1)(2b+2)(2c-1)c(2c+1)}\right\}^{1/2},\end{aligned}$$

$$
\begin{Bmatrix} a & b & c \\ 1 & c & b \end{Bmatrix} = (-1)^{a+b+c+1}
$$

$$
\times \frac{(a+b+c+2)(-a+b+c)-(a+b-c)(a-b+c)}{\{(2b)(2b+1)(2b+2)(2c)(2c+1)(2c+2)\}^{1/2}}
$$

$$
= (-1)^{a+b+c} \frac{a(a+1)-b(b+1)-c(c+1)}{\{b(2b+1)(2b+2)c(2c+1)(2c+2)\}^{1/2}}
$$

附录 15　协变张量和逆变张量

设群 G 是由 N 维方矩阵 R 集合构成的矩阵群, 把 R 看成是 N 维空间的坐标变换

$$
x_a \xrightarrow{R} x'_a = \sum_d R_{ad} x_d \tag{A15.1}
$$

则包含 N^n 个分量, 在变换 R 中按下式变换的量 $\boldsymbol{T}(x)_{a_1\cdots a_n}$

$$
[O_R \boldsymbol{T}(x)]_{a_1\cdots a_n} = \sum_{d_1\cdots d_n} R_{a_1 d_1}\cdots R_{a_n d_n} \boldsymbol{T}(R^{-1}x)_{d_1\cdots d_n} \tag{A15.2}
$$

称为关于矩阵群 G 的 n 阶协变张量场. 如果张量分量与坐标 x 无关, 则协变张量场简称协变张量. 协变张量场可按协变张量基 $\boldsymbol{\Theta}_{b_1\cdots b_n}$ 展开

$$
(\boldsymbol{\Theta}_{b_1\cdots b_n})_{a_1\cdots a_n} = \delta_{a_1 b_1}\cdots\delta_{a_n b_n} \tag{A15.3}
$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{T}(x) &= \sum_{b_1\cdots b_n} T(x)_{b_1\cdots b_n} \boldsymbol{\Theta}_{b_1\cdots b_n} \\
\boldsymbol{T}(x)_{a_1\cdots a_n} &= \sum_{b_1\cdots b_n} T(x)_{b_1\cdots b_n} (\boldsymbol{\Theta}_{b_1\cdots b_n})_{a_1\cdots a_n} = T(x)_{a_1\cdots a_n}
\end{aligned} \tag{A15.4}
$$

展开系数 $T(x)_{a_1\cdots a_n}$ 在数值上等于张量分量 $\boldsymbol{T}(x)_{a_1\cdots a_n}$, 但在 G 变换中, 它却是一个标量, 张量的变换由张量基 $\boldsymbol{\Theta}_{b_1\cdots b_n}$ 来承担

$$
\begin{aligned}
[O_R T(x)]_{a_1\cdots a_n} &= [P_R T(x)]_{a_1\cdots a_n} = T(R^{-1}x)_{a_1\cdots a_n} \\
O_R \boldsymbol{\Theta}_{b_1\cdots b_n} &= Q_R \boldsymbol{\Theta}_{b_1\cdots b_n} = \sum_{d_1\cdots d_n} \boldsymbol{\Theta}_{d_1\cdots d_n} R_{d_1 b_1}\cdots R_{d_n b_n}
\end{aligned} \tag{A15.5}
$$

因为

$$
\begin{aligned}
[O_R \boldsymbol{\Theta}_{b_1\cdots b_n}]_{a_1\cdots a_n} &= \sum_{d_1\cdots d_n} R_{a_1 d_1}\cdots R_{a_n d_n} [\boldsymbol{\Theta}_{b_1\cdots b_n}]_{d_1\cdots d_n} \\
&= R_{a_1 b_1}\cdots R_{a_n b_n} = \sum_{d_1\cdots d_n} [\boldsymbol{\Theta}_{d_1\cdots d_n}]_{a_1\cdots a_n} R_{d_1 b_1}\cdots R_{d_n b_n}
\end{aligned}
$$

包含 N^n 个分量, 在变换 R 中按下式变换的量 $\boldsymbol{T}(x)^{a_1\cdots a_n}$

$$[O_R\boldsymbol{T}(x)]^{a_1\cdots a_n} = \sum_{d_1\cdots d_n} \boldsymbol{T}(R^{-1}x)^{d_1\cdots d_n} \left(R^{-1}\right)_{d_1a_1}\cdots\left(R^{-1}\right)_{d_na_n} \tag{A15.6}$$

称为关于矩阵群 G 的 n 阶逆变张量场. 如果张量分量与坐标 x 无关, 则逆变张量场简称逆变张量. 同样, 逆变张量场可按逆变张量基 $\boldsymbol{\Theta}^{b_1\cdots b_n}$ 展开

$$(\boldsymbol{\Theta}_{b_1\cdots b_n})^{a_1\cdots a_n} = \delta_{a_1b_1}\cdots\delta_{a_nb_n} \tag{A15.7}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{T}(x) &= \sum_{b_1\cdots b_n} T(x)^{b_1\cdots b_n}\boldsymbol{\Theta}^{b_1\cdots b_n},\\ \boldsymbol{T}(x)^{a_1\cdots a_n} &= \sum_{b_1\cdots b_n} T(x)^{b_1\cdots b_n}\left(\boldsymbol{\Theta}_{b_1\cdots b_n}\right)^{a_1\cdots a_n} = T(x)^{a_1\cdots a_n}\end{aligned} \tag{A15.8}$$

展开系数 $T(x)^{a_1\cdots a_n}$ 在数值上等于张量分量 $\boldsymbol{T}(x)^{a_1\cdots a_n}$, 但在 G 变换中, 它却是一个标量, 张量的变换由张量基 $\boldsymbol{\Theta}^{b_1\cdots b_n}$ 来承担

$$\begin{aligned}&[O_RT(x)]^{a_1\cdots a_n} = [P_RT(x)]^{a_1\cdots a_n} = T(R^{-1}x)^{a_1\cdots a_n},\\ &O_R\boldsymbol{\Theta}_{b_1\cdots b_n} = Q_R\boldsymbol{\Theta}_{b_1\cdots b_n} = \sum_{d_1\cdots d_n}\left(R^{-1}\right)_{b_1d_1}\cdots\left(R^{-1}\right)_{b_nd_n}\boldsymbol{\Theta}_{d_1\cdots d_n}\end{aligned} \tag{A15.9}$$

包含 N^{n+m} 个分量, 在变换 R 中按下式变换的量 $\boldsymbol{T}(x)^{b_1\cdots b_m}_{a_1\cdots a_n}$

$$[O_R\boldsymbol{T}(x)]^{b_1\cdots b_m}_{a_1\cdots a_n} = \sum_{c_1\cdots c_nd_1\cdots d_m} R_{a_1c_1}\cdots R_{a_nc_n}\boldsymbol{T}(R^{-1}x)^{d_1\cdots d_m}_{c_1\cdots c_n}\left(R^{-1}\right)_{d_1a_1}\cdots\left(R^{-1}\right)_{d_na_n} \tag{A15.10}$$

称为关于矩阵群 G 的 (n,m) 阶混合张量场.

附录 16　J^2, J_3, S^2 和 $\vec{S}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}$ 的共同本征函数

这四个算符是可以互相对易的, 因而可以有共同的本征函数.

设 $\boldsymbol{e}^{(s)}(\rho)_\lambda$ 是 s 阶旋量的旋量基

$$O_R\boldsymbol{e}^{(s)}(\rho) = Q_R\boldsymbol{e}^{(s)}(\rho) = \sum_\sigma \boldsymbol{e}^{(s)}(\sigma)D^s_{\sigma\rho}(R) \tag{A16.1}$$

则 $\boldsymbol{e}^{(s)}(\rho)_\lambda$ 是属 SU(2) 群不可约表示 D^s ρ 行的函数, 是 S^2 和 S_3 的共同本征函数

$$S^2\boldsymbol{e}^{(s)}(\rho) = s(s+1)\boldsymbol{e}^{(s)}(\rho), \qquad S_3\boldsymbol{e}^{(s)}(\rho) = \rho\boldsymbol{e}^{(s)}(\rho) \tag{A16.2}$$

设 $T = R(\varphi,\theta,\gamma)$ 和 $T_0 = R(\varphi,\theta,0)$, 其中 θ 和 φ 是径向 $\hat{\boldsymbol{r}}$ 的极角和方位角, 则 S^2 和 $\vec{S}\cdot\hat{\boldsymbol{r}} = Q_{T_0}S_3Q_{T_0}^{-1}$ 的共同本征函数为

$$Q_{T_0}\boldsymbol{e}^{(s)}(\rho) = \sum_\sigma \boldsymbol{e}^{(s)}(\sigma)D^s_{\sigma\rho}(\varphi,\theta,0) \tag{A16.3}$$

本征值为 $s(s+1)$ 和 ρ.

设 $\boldsymbol{\Psi}^j_\mu(x)$ 是 s 阶旋量, 是属 SU(2) 群不可约表示 D^j μ 行的函数

$$O_R\boldsymbol{\Psi}^j_\mu(x)=D^s(R)\boldsymbol{\Psi}^j_\mu(R^{-1}x)=\sum_\nu \boldsymbol{\Psi}^j_\nu(x)D^j_{\nu\mu}(R) \tag{A16.4}$$

因而 $\boldsymbol{\Psi}^j_\mu(x)$ 是 J^2, J_3 和 S^2 的共同本征函数

$$J^2\boldsymbol{\Psi}^j_\mu(x)=j(j+1)\boldsymbol{\Psi}^j_\mu(x),\qquad J_3\boldsymbol{\Psi}^j_\mu(x)=\mu\boldsymbol{\Psi}^j_\mu(x),\qquad S^2\boldsymbol{\Psi}^j_\mu(x)=s(s+1)\boldsymbol{\Psi}^j_\mu(x) \tag{A16.5}$$

式 (A16.4) 中取 R 为 T^{-1}, 取 x 为 $x_0=(r,0,0)$, 则 $Tx_0=(r,\theta,\varphi)$

$$D^s(T^{-1})\boldsymbol{\Psi}^j_\mu(Tx_0)=O_{T^{-1}}\boldsymbol{\Psi}^j_\mu(x_0)=\sum_\nu \boldsymbol{\Psi}^j_\nu(x_0)D^j_{\nu\mu}(T^{-1})$$

两边乘 $D^s(T)$, 并把 Tx_0 记作 x

$$\boldsymbol{\Psi}^j_\mu(x)=\sum_\nu D^s(T)\boldsymbol{\Psi}^j_\nu(x_0)D^j_{\nu\mu}(T^{-1}) \tag{A16.6}$$

把旋量按旋量基展开, 并把 T 的欧拉角代入

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Psi}^j_\mu(x) &= \sum_{\sigma\rho\nu} \boldsymbol{e}^{(s)}(\sigma)D^s_{\sigma\rho}(T)\,\Psi^j_\nu(x_0)_\rho D^j_{\mu\nu}(T)^*\\ &= \sum_{\sigma\rho\nu} \boldsymbol{e}^{(s)}(\sigma)d^s_{\sigma\rho}(\theta)\,\Psi^j_\nu(x_0)_\rho d^j_{\mu\nu}(\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(\mu-\sigma)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma(\nu-\rho)}\end{aligned}$$

等式左面与 γ 角无关, 等式右面也必须与 γ 角无关, 因此 $\Psi^j_\nu(x_0)_\rho$ 的一般形式是

$$\Psi^j_\nu(x_0)_\rho=\phi_\nu(r)\delta_{\rho\nu} \tag{A16.7}$$

无论 $\phi_\nu(r)$ 取什么值, 只要不为零, 下式都是 J^2, J_3 和 S^2 的共同本征函数

$$\boldsymbol{\Psi}^j_\mu(x)=\sum_\nu\left\{\sum_\sigma \boldsymbol{e}^{(s)}(\sigma)D^s_{\sigma\nu}(\varphi,\theta,0)\right\}\phi_\nu(r)D^j_{\mu\nu}(\varphi,\theta,0)^* \tag{A16.8}$$

由式 (A16.3), 花括号中的量是 $\vec{S}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}$ 的本征值为 ν 的本征函数, 因而如果 $\phi_\nu(r)=\delta_{\nu\rho}$, 即式 (A16.7) 中对 ν 的求和只有一项时, $\boldsymbol{\Psi}^j_\mu(x)$ 就是 J^2, J_3, S^2 和 $\vec{S}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}$ 的共同本征函数

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{\Psi}^j_{\mu\rho}(x)=\sum_\sigma \boldsymbol{e}^{(s)}(\sigma)D^s_{\sigma\rho}(\varphi,\theta,0)D^j_{\mu\rho}(\varphi,\theta,0)^*,\\ &J^2\boldsymbol{\Psi}^j_{\mu\rho}(x)=j(j+1)\boldsymbol{\Psi}^j_{\mu\rho}(x),\qquad J_3\boldsymbol{\Psi}^j_{\mu\rho}(x)=\mu\boldsymbol{\Psi}^j_{\mu\rho}(x),\\ &S^2\boldsymbol{\Psi}^j_{\mu\rho}(x)=s(s+1)\boldsymbol{\Psi}^j_{\mu\rho}(x),\qquad \left(\vec{S}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\right)\boldsymbol{\Psi}^j_{\mu\rho}(x)=\rho\boldsymbol{\Psi}^j_{\mu\rho}(x)\end{aligned} \tag{A16.9}$$

附录 17　简单空间群的性质

在本附录的表 A17.1 中列出 7 种晶系, 14 种布拉菲格子和 73 种简单空间群, 并列出晶格基矢的选择及其与转动轴向的关系. 表后面还列出子循环点群生成元在这些晶格基矢中的矩阵形式. 生成元符号上的撇标记它们的转动轴方向, 沿 $\vec{a}_3$ 方向的生成元不带撇, 沿其他方向的高次轴或沿 $\vec{a}_1$ 方向的二次轴的生成元带一撇, 沿其他方向的二次轴生成元带两撇, 菱方晶系例外.

表 A17.1

晶系, 布拉菲格子和简单空间群数	点群		表成循环子群的乘积形式	基矢的关连	转动轴向和基矢的关系		
	熊氏符号	国际符号					
三斜晶系 P	C_1	1	C_1				
空间群数 2	C_i	$\bar{1}$	C_i				
单斜晶系						$\vec{a}_3$	
P, A	C_2	2	C_2	$\alpha_1=\alpha_2$		2	
简单空间	C_s	$\bar{2}$	C_s	$=\pi/2$		$\bar{2}$	
群数 6	C_{2h}	± 2	C_iC_2			± 2	
正交晶系						$\vec{a}_3$	$\vec{a}_1$
P, C, I, F	D_2	$22'$	C_2C_2'	$\alpha_1=\alpha_2$		2	2
空间群数 13	D_{2h}	$\pm 22'$	$C_iC_2C_2'$	$=\alpha_3$		± 2	± 2
P, A, C, I, F	C_{2v}	$2\bar{2}'$	C_2C_s'	$=\pi/2$		2	$\bar{2}$
四方晶系					$\vec{a}_3$	$\vec{a}_1$	$\vec{a}_1+\vec{a}_2$
P, I	C_4	4	C_4	$a_1=a_2$	4		
简单空间	S_4	$\bar{4}$	S_4	$\alpha_1=\alpha_2$	$\bar{4}$		
群数 16	C_{4h}	± 4	C_iC_4	$=\alpha_3$	± 4		
	D_4	$42'$	C_4C_2'	$=\pi/2$	4	2	2
	C_{4v}	$4\bar{2}'$	C_4C_s'		4	$\bar{2}$	$\bar{2}$
	D_{2d}	$\bar{4}2'$	S_4C_2'		$\bar{4}$	2	$\bar{2}$
	D_{2d}	$\bar{4}2''$	S_4C_2''		$\bar{4}$	$\bar{2}$	2
	D_{4h}	$\pm 42'$	$C_iC_4C_2'$		± 4	± 2	± 2
立方晶系					$\vec{a}_3$	$\vec{a}'$	$\vec{a}_1+\vec{a}_2$
P, I, F	T	$3'22'$	$C_3'C_2C_2'$	$a_1=a_2$	2	3	
简单空间	T_h	$\bar{3}22'$	$C_{3i}'C_2C_2'$	$=a_3$	± 2	$\bar{3}$	
群数 15	O	$3'42''$	$C_3'C_4C_2''$	$\alpha_1=\alpha_2$	4	3	2
	T_d	$3'\bar{4}\,\bar{2}''$	$C_3S_4C_s''$	$=\alpha_3$	$\bar{4}$	3	$\bar{2}$
	O_h	$\bar{3}'42''$	$C_{3i}'C_4C_2''$	$=\pi/2$	± 4	$\bar{3}$	± 2
菱方晶系						$\vec{a}'$	$\vec{a}_1-\vec{a}_2$
R	C_3	3	C_3	$a_1=a_2$		3	
简单空间	C_{3i}	$\bar{3}$	C_{3i}	$=a_3$		$\bar{3}$	
群数 5	D_3	$32'$	C_3C_2'	$\alpha_1=\alpha_2$		3	2
	C_{3v}	$3\bar{2}'$	C_3C_s'	$=\alpha_3$		3	$\bar{2}$
	D_{3d}	$\bar{3}2'$	$C_{3i}C_2'$			$\bar{3}$	± 2

(续表)

晶系, 布拉菲格子和简单空间群数	点群		表成循环子群的乘积形式	基矢的关连	转动轴向和基矢的关系		
	熊氏符号	国际符号					
六方晶系					$\vec{a}_3$	$\vec{a}_1$	$\vec{a}_1-\vec{a}_2$
P	C_3	3	C_3	$a_1=a_2$	3		
简单空间	C_{3i}	$\overline{3}$	C_{3i}	$\alpha_1=\alpha_2$	$\overline{3}$		
群数 16	D_3	$32'$	C_3C_2'	$=\pi/2$	3	2	
	D_3	$32''$	C_3C_2''	$\alpha_3=2\pi/3$	3		2
	C_{3v}	$3\overline{2}'$	C_3C_s'		3	$\overline{2}$	
	C_{3v}	$3\overline{2}''$	C_3C_s''		3		$\overline{2}$
	D_{3d}	$\overline{3}2'$	$C_{3i}C_2'$		$\overline{3}$	±2	
	D_{3d}	$\overline{3}2''$	$C_{3i}C_2''$		$\overline{3}$		±2
	C_6	6	C_6		6		
	C_{3h}	$\overline{6}$	C_{3h}		$\overline{6}$		
	C_{6h}	±6	C_iC_6		±6		
	D_6	$62'$	C_6C_2'		6	2	2
	C_{6v}	$6\overline{2}'$	C_6C_s'		6	$\overline{2}$	$\overline{2}$
	D_{3h}	$\overline{6}2'$	$C_{3h}C_2'$		$\overline{6}$	2	$\overline{2}$
	D_{3h}	$\overline{6}2''$	$C_{3h}C_2''$		$\overline{6}$	$\overline{2}$	2
	D_{6h}	$\pm62'$	$C_iC_6C_2'$		±6	±2	±2

附: 1. 六方晶系循环子群的生成元

$$C_6=\begin{pmatrix}1&-1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix},\qquad C_3=\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix},$$

$$C_2'=\begin{pmatrix}1&-1&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix},\qquad C_2''=\begin{pmatrix}0&-1&0\\-1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

2. 菱方晶系循环子群的生成元

$$C_3=\begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix},\qquad C_2'=\begin{pmatrix}0&-1&0\\-1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

3. 其他各循环子群的生成元

$$C_1=-C_i=\mathbf{1},\qquad C_2=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix},$$

$$C_2'=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix},\qquad C_2''=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix},$$

$$C_4=\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix},\qquad C_3=\begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}$$

4. $\vec{a'}=\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3$.

附录 18　230 种空间群

为了看得清楚, 表中把空间群国际符号里应作为下标的量用括号表出, 例如空间群 D_{2h}^{24}, 应表为 $F\pm 2_{\frac{1}{4}\frac{1}{4}0}2'_{0\frac{1}{4}\frac{1}{4}}$, 现表为 $F\pm 2\left(\frac{1}{4}\frac{1}{4}0\right)2'\left(0\frac{1}{4}\frac{1}{4}\right)$. 表中带星号的空间群是简单空间群.

表 A18.1　三斜晶系

序号	熊氏符号	国际符号	序号	熊氏符号	国际符号
*1	C_1^1	$P1$	*2	C_i^1	$P\overline{1}$

表 A18.2　单斜晶系

序号	熊氏符号	国际符号	序号	熊氏符号	国际符号
*3	C_2^1	$P2$	*10	C_{2h}^1	$P\pm 2$
4	C_2^2	$P2(0\frac{1}{2}0)$	11	C_{2h}^2	$P\pm 2(0\frac{1}{2}0)$
*5	C_2^3	$A2$	*12	C_{2h}^3	$A\pm 2$
*6	C_s^1	$P\overline{2}$	13	C_{2h}^4	$P\pm 2(\frac{1}{2}00)$
7	C_s^2	$P\overline{2}(\frac{1}{2}00)$	14	C_{2h}^5	$P\pm 2(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
*8	C_s^3	$A\overline{2}$	15	C_{2h}^6	$A\pm 2(\frac{1}{2}00)$
9	C_s^4	$A\overline{2}(\frac{1}{2}00)$			

表 A18.3　正交晶系

序号	熊氏符号	国际符号	序号	熊氏符号	国际符号
*16	D_2^1	$P22'$	32	C_{2v}^8	$P2\overline{2}'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
17	D_2^2	$P22'(0\frac{1}{2}0)$	33	C_{2v}^9	$P2(00\frac{1}{2})\overline{2}'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
18	D_2^3	$P22'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	34	C_{2v}^{10}	$P2\overline{2}'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
19	D_2^4	$P2(00\frac{1}{2})2'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	*35	C_{2v}^{11}	$C2\overline{2}'$
20	D_2^5	$A22'(\frac{1}{2}00)$	36	C_{2v}^{12}	$C2(00\frac{1}{2})\overline{2}'$
*21	D_2^6	$A22'$	37	C_{2v}^{13}	$C2\overline{2}'(00\frac{1}{2})$
*22	D_2^7	$F22'$	*38	C_{2v}^{14}	$A2\overline{2}'$
*23	D_2^8	$I22'$	39	C_{2v}^{15}	$A2\overline{2}'(0\frac{1}{2}0)$
24	D_2^9	$I2(00\frac{1}{2})2'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	40	C_{2v}^{16}	$A2\overline{2}'(\frac{1}{2}00)$
*25	C_{2v}^1	$P2\overline{2}'$	41	C_{2v}^{17}	$A2\overline{2}'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
26	C_{2v}^2	$P2(00\frac{1}{2})\overline{2}'$	*42	C_{2v}^{18}	$F2\overline{2}'$
27	C_{2v}^3	$P2\overline{2}'(00\frac{1}{2})$	43	C_{2v}^{19}	$F2\overline{2}'(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4})$
28	C_{2v}^4	$P2\overline{2}'(\frac{1}{2}00)$	*44	C_{2v}^{20}	$I2\overline{2}'$
29	C_{2v}^5	$P2(00\frac{1}{2})\overline{2}'(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$	45	C_{2v}^{21}	$I2\overline{2}'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
30	C_{2v}^6	$P2\overline{2}'(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	46	C_{2v}^{22}	$I2\overline{2}'(\frac{1}{2}00)$
31	C_{2v}^7	$P2(00\frac{1}{2})\overline{2}'(\frac{1}{2}00)$	*47	D_{2h}^1	$P\pm 22'$

(续表)

序号	熊氏符号	国际符号	序号	熊氏符号	国际符号
48	D_{2h}^{2}	$P\pm2(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)2'(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	62	D_{2h}^{16}	$P\pm2(00\frac{1}{2})2'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
49	D_{2h}^{3}	$P\pm22'(00\frac{1}{2})$	63	D_{2h}^{17}	$A\pm22'(\frac{1}{2}00)$
50	D_{2h}^{4}	$P\pm2(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)2'(0\frac{1}{2}0)$	64	D_{2h}^{18}	$A\pm22'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
51	D_{2h}^{5}	$P\pm22'(\frac{1}{2}00)$	*65	D_{2h}^{19}	$A\pm22'$
52	D_{2h}^{6}	$P\pm2(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)2'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	66	D_{2h}^{20}	$A\pm2(\frac{1}{2}00)2'$
53	D_{2h}^{7}	$P\pm22'(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$	67	D_{2h}^{21}	$A\pm22'(0\frac{1}{2}0)$
54	D_{2h}^{8}	$P\pm2(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})2'(00\frac{1}{2})$	68	D_{2h}^{22}	$A\pm2(\frac{1}{2}00)2'(0\frac{1}{2}0)$
55	D_{2h}^{9}	$P\pm22'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	*69	D_{2h}^{23}	$F\pm22'$
56	D_{2h}^{10}	$P\pm2(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)2'(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$	70	D_{2h}^{24}	$F\pm2(\frac{1}{4}\frac{1}{4}0)2'(0\frac{1}{4}\frac{1}{4})$
57	D_{2h}^{11}	$P\pm2(00\frac{1}{2})2'(0\frac{1}{2}0)$	*71	D_{2h}^{25}	$I\pm22'$
58	D_{2h}^{12}	$P\pm22'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	72	D_{2h}^{26}	$I\pm22'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
59	D_{2h}^{13}	$P\pm2(00\frac{1}{2})2'(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	73	D_{2h}^{27}	$I\pm2(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})2'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
60	D_{2h}^{14}	$P\pm2(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)2'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	74	D_{2h}^{28}	$I\pm22'(\frac{1}{2}00)$
61	D_{2h}^{15}	$P\pm2(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})2'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$			

表 A18.4　四方晶系

序号	熊氏符号	国际符号	序号	熊氏符号	国际符号
*75	C_{4}^{1}	$P4$	98	D_{4}^{10}	$I4(00\frac{1}{4})2'$
76	C_{4}^{2}	$P4(00\frac{1}{4})$	*99	C_{4v}^{1}	$P4\overline{2}'$
77	C_{4}^{3}	$P4(00\frac{1}{2})$	100	C_{4v}^{2}	$P4\overline{2}'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
78	C_{4}^{4}	$P4(00\frac{3}{4})$	101	C_{4v}^{3}	$P4(00\frac{1}{2})\overline{2}'(00\frac{1}{2})$
*79	C_{4}^{5}	$I4$	102	C_{4v}^{4}	$P4(00\frac{1}{2})\overline{2}'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
80	C_{4}^{6}	$I4(00\frac{1}{4})$	103	C_{4v}^{5}	$P4\overline{2}'(00\frac{1}{2})$
*81	S_{4}^{1}	$P\overline{4}$	104	C_{4v}^{6}	$P4\overline{2}'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
*82	S_{4}^{2}	$I\overline{4}$	105	C_{4v}^{7}	$P4(00\frac{1}{2})\overline{2}'$
*83	C_{4h}^{1}	$P\pm4$	106	C_{4v}^{8}	$P4(00\frac{1}{2})\overline{2}'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
84	C_{4h}^{2}	$P\pm4(00\frac{1}{2})$	*107	C_{4v}^{9}	$I4\overline{2}'$
85	C_{4h}^{3}	$P\pm4(\frac{1}{2}00)$	108	C_{4v}^{10}	$I4\overline{2}'(00\frac{1}{2})$
86	C_{4h}^{4}	$P\pm4(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	109	C_{4v}^{11}	$I4(00\frac{1}{4})\overline{2}'(\frac{1}{2}00)$
*87	C_{4h}^{5}	$I\pm4$	110	C_{4v}^{12}	$I4(00\frac{1}{4})\overline{2}'(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$
88	C_{4h}^{6}	$I\pm4(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4})$	*111	D_{2d}^{1}	$P\overline{4}2'$
*89	D_{4}^{1}	$P42'$	112	D_{2d}^{2}	$P\overline{4}2'(00\frac{1}{2})$
90	D_{4}^{2}	$P42'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	113	D_{2d}^{3}	$P\overline{4}2'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
91	D_{4}^{3}	$P4(00\frac{1}{4})2'$	114	D_{2d}^{4}	$P\overline{4}2'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
92	D_{4}^{4}	$P4(00\frac{1}{4})2'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	*115	D_{2d}^{5}	$P\overline{4}2''$
93	D_{4}^{5}	$P4(00\frac{1}{2})2'$	116	D_{2d}^{6}	$P\overline{4}2''(00\frac{1}{2})$
94	D_{4}^{6}	$P4(00\frac{1}{2})2'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	117	D_{2d}^{7}	$P\overline{4}2''(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
95	D_{4}^{7}	$P4(00\frac{3}{4})2'$	118	D_{2d}^{8}	$P\overline{4}2''(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
96	D_{4}^{8}	$P4(00\frac{3}{4})2'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	*119	D_{2d}^{9}	$I\overline{4}2''$
*97	D_{4}^{9}	$I42'$	120	D_{2d}^{10}	$I\overline{4}2''(00\frac{1}{2})$

(续表)

序号	熊氏符号	国际符号	序号	熊氏符号	国际符号
*121	D_{2d}^{11}	$I\bar{4}2'$	132	D_{4h}^{10}	$P\pm4(00\frac{1}{2})2'(00\frac{1}{2})$
122	D_{2d}^{12}	$I\bar{4}2'(0\frac{1}{2}\ \frac{1}{4})$	133	D_{4h}^{11}	$P\pm4(0\frac{1}{2}\ \frac{1}{2})2'(0\frac{1}{2}0)$
*123	D_{4h}^{1}	$P\pm42'$	134	D_{4h}^{12}	$P\pm4(0\frac{1}{2}\ \frac{1}{2})2'(0\frac{1}{2}\ \frac{1}{2})$
124	D_{4h}^{2}	$P\pm42'(00\frac{1}{2})$	135	D_{4h}^{13}	$P\pm4(00\frac{1}{2})2'(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}0)$
125	D_{4h}^{3}	$P\pm4(\frac{1}{2}00)2'(0\frac{1}{2}0)$	136	D_{4h}^{14}	$P\pm4(00\frac{1}{2})2'(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2})$
126	D_{4h}^{4}	$P\pm4(\frac{1}{2}00)2'(0\frac{1}{2}\ \frac{1}{2})$	137	D_{4h}^{15}	$P\pm4(0\frac{1}{2}\ \frac{1}{2})2'(\frac{1}{2}00)$
127	D_{4h}^{5}	$P\pm42'(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}0)$	138	D_{4h}^{16}	$P\pm4(0\frac{1}{2}\ \frac{1}{2})2'(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$
128	D_{4h}^{6}	$P\pm42'(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2})$	*139	D_{4h}^{17}	$I\pm42'$
129	D_{4h}^{7}	$P\pm4(\frac{1}{2}00)2'(\frac{1}{2}00)$	140	D_{4h}^{18}	$I\pm42'(00\frac{1}{2})$
130	D_{4h}^{8}	$P\pm4(\frac{1}{2}00)2'(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$	141	D_{4h}^{19}	$I\pm4(\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4})2'(\frac{1}{2}00)$
131	D_{4h}^{9}	$P\pm4(00\frac{1}{2})2'$	142	D_{4h}^{20}	$I\pm4(\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4})2'(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$

表 A18.5　三方晶系

序号	熊氏符号	国际符号	序号	熊氏符号	国际符号
*143	C_{3}^{1}	$P3$	*156	C_{3v}^{1}	$P3\bar{2}'$
144	C_{3}^{2}	$P3(00\frac{1}{3})$	*157	C_{3v}^{2}	$P3\bar{2}''$
145	C_{3}^{3}	$P3(00\frac{2}{3})$	158	C_{3v}^{3}	$P3\bar{2}'(00\frac{1}{2})$
*146	C_{3}^{4}	$R3$	159	C_{3v}^{4}	$P3\bar{2}''(00\frac{1}{2})$
*147	C_{3i}^{1}	$P\bar{3}$	*160	C_{3v}^{5}	$R3\bar{2}'$
*148	C_{3i}^{2}	$R\bar{3}$	161	C_{3v}^{6}	$R3\bar{2}'(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2})$
*149	D_{3}^{1}	$P32''$	*162	D_{3d}^{1}	$P\bar{3}2''$
*150	D_{3}^{2}	$P32'$	163	D_{3d}^{2}	$P\bar{3}2''(00\frac{1}{2})$
151	D_{3}^{3}	$P3(00\frac{1}{3})2''$	*164	D_{3d}^{3}	$P\bar{3}2'$
152	D_{3}^{4}	$P3(00\frac{1}{3})2'$	165	D_{3d}^{4}	$P\bar{3}2'(00\frac{1}{2})$
153	D_{3}^{5}	$P3(00\frac{2}{3})2''$	*166	D_{3d}^{5}	$R\bar{3}2'$
154	D_{3}^{6}	$P3(00\frac{2}{3})2'$	167	D_{3d}^{6}	$R\bar{3}2'(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2})$
*155	D_{3}^{7}	$R32'$			

表 A18.6　六方晶系

序号	熊氏符号	国际符号	序号	熊氏符号	国际符号
*168	C_{6}^{1}	$P6$	*177	D_{6}^{1}	$P62'$
169	C_{6}^{2}	$P6(00\frac{1}{6})$	178	D_{6}^{2}	$P6(00\frac{1}{6})2'$
170	C_{6}^{3}	$P6(00\frac{5}{6})$	179	D_{6}^{3}	$P6(00\frac{5}{6})2'$
171	C_{6}^{4}	$P6(00\frac{1}{3})$	180	D_{6}^{4}	$P6(00\frac{1}{3})2'$
172	C_{6}^{5}	$P6(00\frac{2}{3})$	181	D_{6}^{5}	$P6(00\frac{2}{3})2'$
173	C_{6}^{6}	$P6(00\frac{1}{2})$	182	D_{6}^{6}	$P6(00\frac{1}{2})2'$
*174	C_{3h}^{1}	$P\bar{6}$	*183	C_{6v}^{1}	$P6\bar{2}'$
*175	C_{6h}^{1}	$P\pm6$	184	C_{6v}^{2}	$P6\bar{2}'(00\frac{1}{2})$
176	C_{6h}^{2}	$P\pm6(00\frac{1}{2})$	185	C_{6v}^{3}	$P6(00\frac{1}{2})\bar{2}'(00\frac{1}{2})$

(续表)

序号	熊氏符号	国际符号	序号	熊氏符号	国际符号
186	C_{6v}^4	$P6(00\frac{1}{2})\overline{2}'$	*191	D_{6h}^1	$P\pm 62'$
*187	D_{3h}^1	$P\overline{6}2''$	192	D_{6h}^2	$P\pm 62'(00\frac{1}{2})$
188	D_{3h}^2	$P\overline{6}2''(00\frac{1}{2})$	193	D_{6h}^3	$P\pm 6(00\frac{1}{2})2'(00\frac{1}{2})$
*189	D_{3h}^3	$P\overline{6}2'$	194	D_{6h}^4	$P\pm 6(00\frac{1}{2})2'$
190	D_{3h}^4	$P\overline{6}2'(00\frac{1}{2})$			

表 A18.7　立方晶系

序号	熊氏符号	国际符号	序号	熊氏符号	国际符号
*195	T^1	$P3'22'$	213	O^7	$P3'4(\frac{1}{4}\,\frac{3}{4}\,\frac{1}{4})2''(\frac{3}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{4})$
*196	T^2	$F3'22'$	214	O^8	$I3'4(\frac{1}{4}\,\frac{3}{4}\,\frac{1}{4})2''(\frac{3}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{4})$
*197	T^3	$I3'22'$	*215	T_d^1	$P3'\overline{4}\,\overline{2}''$
198	T^4	$P3'2(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})2'(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}0)$	*216	T_d^2	$F3'\overline{4}\,\overline{2}''$
199	T^5	$I3'2(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})2'(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}0)$	*217	T_d^3	$I3'\overline{4}\,\overline{2}''$
*200	T_h^1	$P\overline{3}'22'$	218	T_d^4	$P3'\overline{4}(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})\overline{2}''(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})$
201	T_h^2	$P\overline{3}'2(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}0)2'(0\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})$	219	T_d^5	$F3'\overline{4}(00\frac{1}{2})\overline{2}''(00\frac{1}{2})$
*202	T_h^3	$F\overline{3}'22'$	220	T_d^6	$I3'\overline{4}(\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{4})\overline{2}''(\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{3}{4})$
203	T_h^4	$F\overline{3}'2(\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}0)2'(0\frac{1}{4}\,\frac{1}{4})$	*221	O_h^1	$P\overline{3}'42''$
*204	T_h^5	$I\overline{3}'22'$	222	O_h^2	$P\overline{3}'4(\frac{1}{2}00)2''(00\frac{1}{2})$
205	T_h^6	$P\overline{3}'2(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})2'(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}0)$	223	O_h^3	$P\overline{3}'4(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})2''(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})$
206	T_h^7	$I\overline{3}'2(0\frac{1}{2}0)2'(00\frac{1}{2})$	224	O_h^4	$P\overline{3}'4(0\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})2''(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}0)$
*207	O^1	$P3'42''$	*225	O_h^5	$F\overline{3}'42''$
208	O^2	$P3'4(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})2''(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})$	226	O_h^6	$F\overline{3}'4(00\frac{1}{2})2''(00\frac{1}{2})$
*209	O^3	$F3'42''$	227	O_h^7	$F\overline{3}'4(0\frac{1}{4}\,\frac{1}{4})2''(\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}0)$
210	O^4	$F3'4(\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{4})2''(\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{4})$	228	O_h^8	$F\overline{3}'4(\frac{1}{2}\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{4})2''(\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{2})$
*211	O^5	$I3'42''$	*229	O_h^9	$I\overline{3}'42''$
212	O^6	$P3'4(\frac{3}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{3}{4})2''(\frac{1}{4}\,\frac{3}{4}\,\frac{3}{4})$	230	O_h^{10}	$I\overline{3}'4(\frac{1}{4}\,\frac{3}{4}\,\frac{1}{4})2''(\frac{3}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{4})$

附录 19　立特武德 – 理查森规则的应用举例

利用立特武德 – 理查森规则可以计算置换群两不可约表示外积的约化和 S_{n+m} 群不可约表示 $[\omega]$ 关于子群 $S_n \otimes S_m$ 分导表示的约化. 在第六章计算了两种约化分解的表示级数. 在这附录里要举例说明如何利用式 (6.139) 和 (6.144) 计算这两种约化的相似变换矩阵. 当表示维数比较高时, 计算工作量会很大. 这里只能选取维数较低的表示, 简明地说明计算方法. 由于计算中只涉及一个左理想中基的组合, 杨算符的正交性不重要了, y_μ 可以略去, 公共的归一化因子 $d/n!$ 也可略去.

例 1　计算 S_2 群表示 $[2]$ 和 S_2 群表示 $[1,1]$ 的外积表示 $[2]\otimes[1,1]$, 按 S_4 群不可约表示约化, 并计算相似变换矩阵.

根据立特武德 - 理查森规则, 外积表示约化的展开式为

$$\begin{array}{|c|c|}\hline \times & \times \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|}\hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|}\hline \times & \times & 1 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1} \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|}\hline \times & \times \\ \hline 1 \\ \cline{1-1} 2 \\ \cline{1-1} \end{array}$$

子群 $S_2 \otimes S_2$ 的不可约表示 $[2] \times [1,1]$ 是一维的, 基为

$$b_1 = \mathcal{Y}_{\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline \end{array}} \otimes \mathcal{Y}_{\begin{array}{|c|}\hline 3 \\ \hline 4 \\ \hline \end{array}} = \{E + (1\ 2)\}\{E - (3\ 4)\}$$

子群的指数为 $4!/(2!2!) = 6$, 因而子群共有 5 个陪集, 外积表示有 $6 \times 1 = 6$ 个基, 除了 b_1 外, 还有

$$\begin{aligned} &b_2 = (1\ 3)b_1\ , \qquad b_3 = (1\ 4)b_1\ , \qquad b_4 = (2\ 3)b_1 \\ &b_5 = (2\ 4)b_1\ , \qquad b_6 = (1\ 3)(2\ 4)b_1 = -(1\ 4)(2\ 3)b_1 \end{aligned}$$

b_6 的计算中用到杨算符的对称性质式 (6.65)

$$(1\ 3)(2\ 4)b_1 = (1\ 3)(4\ 2\ 1)b_1 = (3\ 1\ 4\ 2)b_1 = (1\ 4)(2\ 3)(3\ 4)b_1 = -(1\ 4)(2\ 3)b_1$$

S_4 群的表示 $[3,1]$ 是 3 维的, 杨算符取

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_1 = \mathcal{Y}_{\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 \\ \cline{1-1} \end{array}} &= \{E + (1\ 2) + (1\ 3) + (2\ 3) + (1\ 2\ 3) + (3\ 2\ 1)\}\{E - (1\ 4)\} \\ &= E + (1\ 2) + (1\ 3) + (2\ 3) + (1\ 2\ 3) + (3\ 2\ 1) - (1\ 4) \\ &\quad -(2\ 1\ 4) - (3\ 1\ 4) - (2\ 3)(1\ 4) - (2\ 3\ 1\ 4) - (3\ 2\ 1\ 4) \end{aligned}$$

这表示对应的左理想向外积表示对应的左理想的映射算符为 $\mathcal{Y}_1 b_1$, 因而表示 $[3,1]$ 的基可按外积表示的基 b_μ 展开

$$\begin{aligned} \psi_1 = \mathcal{Y}_1 b_1 &= \{E + E + (1\ 3) + (2\ 3) + (3\ 1) + (3\ 2) - (1\ 4) - (4\ 2) \\ &\quad + (1\ 4) - (2\ 3)(1\ 4) - (4\ 2)(3\ 1) + (2\ 4)\}\, b_1 \\ &= 2b_1 + 2b_2 + 2b_4, \\ \psi_2 &= (3\ 4)\psi_1 = -2b_1 - 2b_3 - 2b_5, \\ \psi_3 &= (2\ 3\ 4)\psi_1 = (4\ 2)\psi_1 = 2b_5 + 2b_6 - 2b_4 \end{aligned}$$

S_4 群的表示 $[2,1,1]$ 也是三维的, 杨算符取

$$\mathcal{Y}_2 = \mathcal{Y}_{\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1} 4 \\ \cline{1-1}\end{array}} = \{E + (1\ 2)\}\{E - (1\ 3) - (1\ 4) - (3\ 4) + (1\ 3\ 4) + (4\ 3\ 1)\}$$

$$\begin{aligned} &= E - (1\ 3) - (1\ 4) - (3\ 4) + (1\ 3\ 4) + (4\ 3\ 1) + (1\ 2) \\ &\quad -(2\ 1\ 3) - (2\ 1\ 4) - (1\ 2)(3\ 4) + (2\ 1\ 3\ 4) + (2\ 1\ 4\ 3) \end{aligned}$$

这表示的左理想向外积表示对应的左理想的映射算符为 $\mathcal{Y}_2 b_1$, 因而表示 $[2,1,1]$ 的基可按外积表示的基 b_μ 展开

$$\begin{aligned} \psi_4 &= \mathcal{Y}_2 b_1 = \{E - (1\ 3) - (1\ 4) + E - (1\ 3) - (1\ 4) \\ &\quad + E - (3\ 2) - (4\ 2) + E - (3\ 2) - (4\ 2)\}\, b_1 \\ &= 4b_1 - 2b_2 - 2b_3 - 2b_4 - 2b_5, \\ \psi_5 &= (2\ 3)\psi_4 = 4b_4 - 2b_2 + 2b_6 - 2b_1 + 2b_5\ , \\ \psi_6 &= (2\ 4\ 3)\psi_4 = -(2\ 4)\psi_4 = -4b_5 + 2b_6 + 2b_3 - 2b_4 + 2b_1 \end{aligned}$$

最后算出相似变换矩阵 X 是

$$X = \begin{pmatrix} 2 & -2 & 0 & 4 & -2 & 2 \\ 2 & 0 & 0 & -2 & -2 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & -2 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & -2 & -2 & 4 & -2 \\ 0 & -2 & 2 & -2 & 2 & -4 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 2 & 2 \end{pmatrix}$$

X 中包含的因子 2 可以移去. X 矩阵不是实正交矩阵, 但满足

$$\{[2] \otimes [1,1]\}\, X = X\, \{[3,1] \oplus [2,1,1]\}$$

S_4 的生成元 $(1\ 2)$ 和 $(1\ 2\ 3\ 4)$ 在表示 $[2] \otimes [1,1]$ 中的矩阵形式分别为

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

而生成元在表示 $[3,1]\oplus[2,1,1]$ 中的矩阵形式可用列表法计算, 得

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

例 2　　计算S_5 群表示 $[3,2]$, 作为子群 $S_3\otimes S_2$ 的分导表示, 按子群不可约表示约化, 并计算相似变换矩阵.

根据立特武德 – 理查森规则, 分导表示 $[3,2]$ 约化式为

×	×	×
1	1	

×	×	1
×	1	

×	×	1
×	2	

$$[3,2]\simeq[3]\times[2]\ \oplus\ [2,1]\times[2]\ \oplus\ [2,1]\times[1,1]$$

表示 $[3,2]$ 的标准基为

$$\begin{aligned} b_1 &= \mathcal{Y}_1=\mathcal{Y}\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\ \hline 4&5\\ \cline{1-2}\end{array} \\ &= \{E+(1\ 2)+(1\ 3)+(2\ 3)+(1\ 2\ 3)+(3\ 2\ 1)\} \\ &\quad\times\{E+(4\ 5)\}\{E-(1\ 4)\}\{E-(2\ 5)\}, \end{aligned}$$

$$b_2=(3\ 4)b_1\ , \qquad b_3=(3\ 5\ 4)b_1=(3\ 5)b_1$$

$$b_4=(2\ 3\ 4)b_1=(4\ 2)b_1\ , \qquad b_5=(2\ 3\ 5\ 4)b_1=(5\ 2)b_1$$

注意, 根据福克条件 (6.68), 有

$$\{E+(1\ 4)+(2\ 4)+(3\ 4)\}\,b_1=0, \qquad \{E+(1\ 5)+(2\ 5)+(3\ 5)\}\,b_1=0$$

子群 $S_3\otimes S_2$ 的表示 $[3]\times[2]$ 是一维的, 幂等元为

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_2 &= \mathcal{Y}\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\ \hline\end{array}\ \mathcal{Y}\begin{array}{|c|c|}\hline 4&5\\ \hline\end{array} \\ &= \{E+(1\ 2)+(1\ 3)+(2\ 3)+(1\ 2\ 3)+(3\ 2\ 1)\}\{E+(4\ 5)\} \end{aligned}$$

它对应的左理想向分导表示对应的左理想的映射算符为 $\mathcal{Y}_2\mathcal{Y}_1$, 因而表示 $[3]\times[2]$ 的基可按分导表示的基 b_μ 展开

$$\psi_1=\mathcal{Y}_2\mathcal{Y}_1=12b_1$$

子群 $S_3 \otimes S_2$ 的表示 $[2,1]\times[2]$ 是二维的, 幂等元为

$$\mathcal{Y}_3 = \mathcal{Y}_{\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array}}\ \mathcal{Y}_{\begin{array}{|c|c|}\hline 4 & 5 \\ \hline\end{array}} = \{E + (1\ 2) - (1\ 3) - (2\ 1\ 3)\}\{E + (4\ 5)\}$$

由于 $\mathcal{Y}_3\mathcal{Y}_1 = 0$, 它对应的左理想向分导表示对应的左理想的映射算符取为 $\mathcal{Y}_3(3\ 4)\mathcal{Y}_1$, 因而表示 $[2,1]\times[2]$ 的基可按分导表示的基 b_μ 展开

$$\begin{aligned}
\psi_2 &= \mathcal{Y}_3(3\ 4)\mathcal{Y}_1 \\
&= \{E + (1\ 2) - (1\ 3) - (2\ 1\ 3)\}\{(3\ 4) + (3\ 5)\}\, b_1 \\
&= \{(3\ 4) + (3\ 4) - (4\ 1) - (4\ 2) + (3\ 5) + (3\ 5) - (5\ 1) - (5\ 2)\}\, b_1 \\
&= 2b_1 + 3b_2 + 3b_3, \\
\psi_3 &= (2\ 3)\psi_2 = \{2E + 3(4\ 2) + 3(5\ 2)\}\, b_1 \\
&= 2b_1 + 3b_4 + 3b_5
\end{aligned}$$

子群 $S_3 \otimes S_2$ 的表示 $[2,1]\times[1,1]$ 是二维的, 幂等元为

$$\mathcal{Y}_4 = \mathcal{Y}_{\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array}}\ \mathcal{Y}_{\begin{array}{|c|}\hline 4 \\ \hline 5 \\ \hline\end{array}} = \{E + (1\ 2) - (1\ 3) - (2\ 1\ 3)\}\{E - (4\ 5)\}$$

由于 $\mathcal{Y}_4\mathcal{Y}_1 = 0$, 它对应的左理想向分导表示对应的左理想的映射算符取为 $\mathcal{Y}_4(3\ 4)\mathcal{Y}_1$, 因而表示 $[2,1]\times[1,1]$ 的基可按分导表示的基 b_μ 展开

$$\begin{aligned}
\psi_4 &= \mathcal{Y}_4(3\ 4)\mathcal{Y}_1 \\
&= \{E + (1\ 2) - (1\ 3) - (2\ 1\ 3)\}\{(3\ 4) - (3\ 5)\}\, b_1 \\
&= \{(3\ 4) + (3\ 4) - (4\ 1) - (4\ 2) - (3\ 5) - (3\ 5) + (5\ 1) + (5\ 2)\}\, b_1 \\
&= 3b_2 - 3b_3, \\
\psi_3 &= (2\ 3)\psi_2 = \{3(4\ 2) - 3(5\ 2)\}\, b_1 = 3b_4 - 3b_5
\end{aligned}$$

最后算出相似变换矩阵 X 是

$$X = \begin{pmatrix} 12 & 2 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & -3 \end{pmatrix}$$

X 矩阵不是实正交矩阵, 但满足

$$\{[3,2]\}\, X = X\, \{([3]\times[2]) \oplus ([2,1]\times[2]) \oplus ([2,1]\times[1,1])\}$$

$S_3 \otimes S_2$ 的生成元 (1 2)(4 5) 和 (1 2 3)(4 5) 在表示 [3, 2] 中的矩阵形式分别为

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

而生成元在表示 $([3] \times [2]) \oplus ([2,1] \times [2]) \oplus ([2,1] \times [1,1])$ 中的矩阵形式分别为

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

附录 20　辫 子 群

辫子群是一类不连续的无限群. 它与纽结 (knot) 和环结 (link) 理论有密切联系. 20 世纪 20 年代提出辫子群和纽结理论后, 由于缺乏有效的工具来研究, 理论处于相对停滞状态. 20 世纪 80 年代, 杨 (Yang)– 巴克斯特 (Baxter) 方程和量子群理论取得突破, 带动了辫子群理论的发展. 置换群是辫子群关于纯辫子群的商群, 是辫子群的一种特殊情况. 本附录对辫子群理论做一些简单的介绍.

一、辫子和辫子群

取两根无穷长的直线, 称为端线, 它们上面各顺序排列着 n 个固定点. 在三维空间, 用 n 根线由上端线的 n 个点分别连到下端线的 n 个点, 连接方式满足下面条件:

(1) 端线上每一点都引出 (或接收), 且只引出 (或接收) 一根线.

(2) 每一根线的走向都单调地由上而下.

(3) 这些线在三维空间互不相交.

这样构成的图形称为一个 n 线辫子 (braid), 简称辫子. 在不扯断任何一根线的条件下, 将线在三维空间移动, 得到的图形称为与原图形等价的辫子. 等价的辫子不予区分.

定义两个辫子的乘积 A_2A_1. 将第二个辫子 A_2 的下端线和第一个辫子 A_1 的上端线重合起来, 端线上的点也对应重合, 并把两个图形的连线分别对应连接起来. 略去中间重合的端线, 整个图形仍是一个 n 线辫子, 称为两个辫子的乘积. 图 A20.1 是三线辫子乘积的例子.

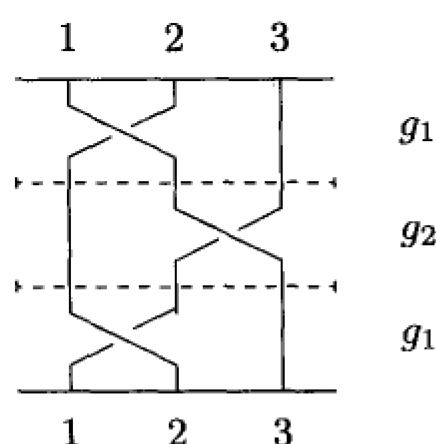


图 A20.1　三线辫子的乘积

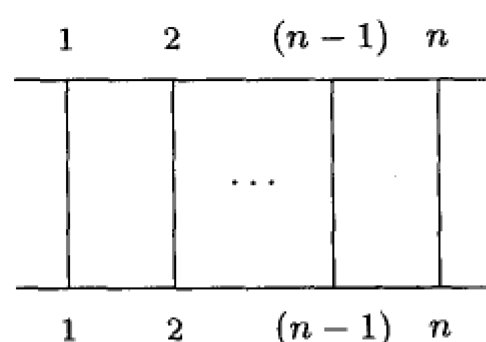


图 A20.2　恒元 E

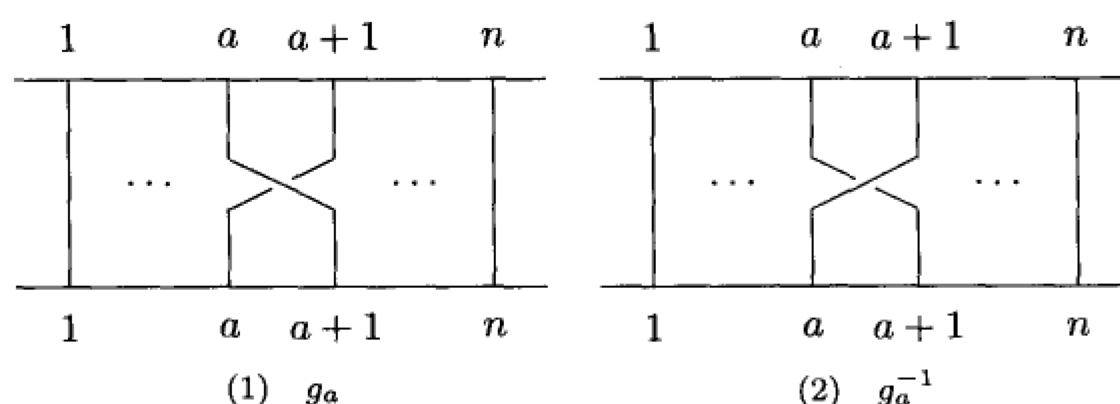


图 A20.3　基本 n 线辫子, $1 \leqslant a < n$

从图 A20.1 的例子中看出, 任一辫子都由若干对线的交叉构成. 完全没有线之间交叉的辫子, 与任何辫子相乘, 仍得原辫子, 故称为恒元 E, 如图 A20.2 所示. 只有相邻一对线交叉的辫子称为基本辫子. n 线辫子有 $2(n-1)$ 个基本辫子 g_a 和 g_a^{-1}, $1 \leqslant a \leqslant n-1$, 如图 A20.3 所示. 由图 A20.3 和 A20.4 可以看出, 这些基本辫子满足如下乘积关系

$$\begin{aligned} &g_a g_b = g_b g_a \ , \qquad \text{当}\ |a-b| \geqslant 2, \\ &g_a g_{a+1} g_a = g_{a+1} g_a g_{a+1}, \\ &g_a g_a^{-1} = g_a^{-1} g_a = E \end{aligned} \tag{A20.1}$$

与相邻客体对换 P_a 的乘积公式 (6.18) 作比较, 差别只是现在 $g_a \neq g_a^{-1}$. 由式 (A20.1) 容易证明

$$\begin{aligned} &g_a^m (g_{a\pm1} g_a) = (g_{a\pm1} g_a) g_{a\pm1}^m, \\ &g_a^m (g_{a\pm1}^{-1} g_a^{-1}) = (g_{a\pm1}^{-1} g_a^{-1}) g_{a\pm1}^m \end{aligned} \tag{A20.2}$$

其中, m 为任何整数.

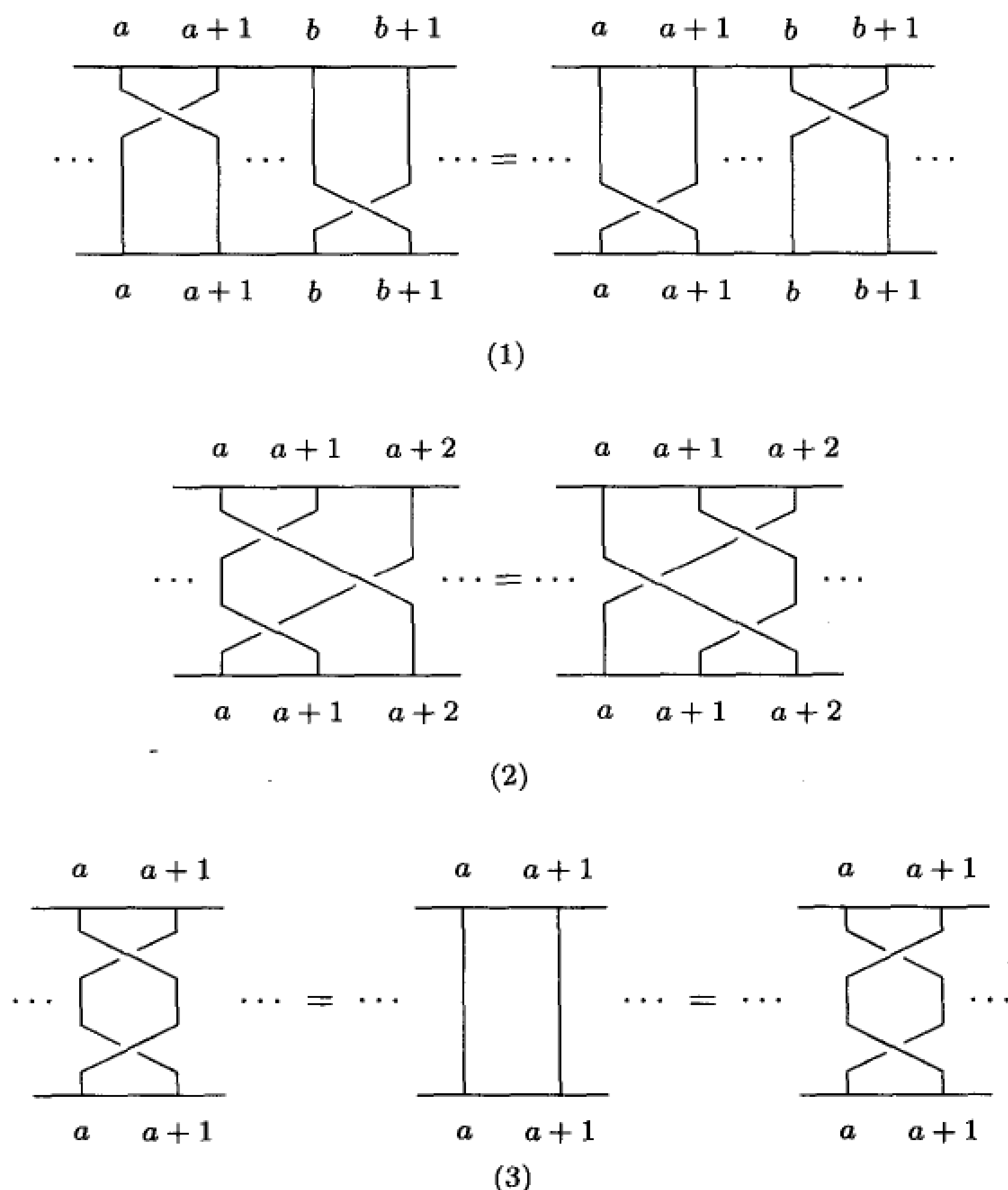


图 A20.4　基本辫子乘积的几个典型关系

每一个 n 线辫子 A 都可以表成一系列基本辫子的乘积. 把每一个基本辫子取逆, 即把 g_a 和 g_a^{-1} 互换, 再把乘积次序颠倒, 就得到 A 的逆 A^{-1}.

所有可能的 n 线辫子的集合, 即由 $2(n-1)$ 个基本辫子 g_a 和 g_a^{-1} 的所有可能乘积的集合, 在上述乘积的定义下, 元素的乘积满足封闭性和结合律, 集合包含恒元和每个元素的逆元, 因而此集合构成群, 称为 n 线辫子群 B_n, 简称辫子群 (braid group). 辫子群是不连续的无限群.

辫子群中有两个重要的元素 Δ 和 Ω

$$\Delta = g_1 g_2 \cdots g_{n-1}\ , \qquad \Omega = g_1 \Delta \tag{A20.3}$$

当 $2 \leqslant a \leqslant n-1$ 时

$$\begin{aligned} g_a \Delta &= g_1 g_2 \cdots g_{a-2}(g_a g_{a-1} g_a) g_{a+1} \cdots g_{n-1} \\ &= g_1 g_2 \cdots g_{a-2}(g_{a-1} g_a g_{a-1}) g_{a+1} \cdots g_{n-1} \\ &= \Delta g_{a-1} \end{aligned} \tag{A20.4}$$

$$
\begin{aligned}
g_1\Delta^2 &= g_1\{g_1(g_2g_1)(g_3g_2)\cdots(g_{n-2}g_{n-3})(g_{n-1}g_{n-2})g_{n-1}\} \\
&= g_1(g_2g_1)g_2(g_3g_2)\cdots(g_{n-2}g_{n-3})(g_{n-1}g_{n-2})g_{n-1} \\
&= \cdots \\
&= \Delta^2 g_{n-1}
\end{aligned}
\tag{A20.5}
$$

因此

$$
\Omega^{n-1} = g_1\Delta g_1\Delta\cdots g_1\Delta = g_1g_2\cdots g_{n-1}\Delta^{n-1} = \Delta^n
$$

归结起来, 有

$$
\begin{aligned}
&\Omega^{n-1} = \Delta^n , \qquad g_1 = \Omega\Delta^{-1}, \\
&g_a = \Delta g_{a-1}\Delta^{-1} = \Delta^{a-1}g_1\Delta^{1-a} = \Delta^{a-1}\Omega\Delta^{-a}, \\
&g_a\Delta^n = \Delta^n g_a , \qquad 1 \leqslant a \leqslant n-1
\end{aligned}
\tag{A20.6}
$$

可见, 辫子群有四个生成元 Δ, Ω 及其逆元. 辫子群的秩是 4. 能和群中所有元素对易的元素集合称为群的中心. B_n 群的中心由恒元和 Δ^n 构成. Δ^n 有一个简单的几何意义, 它代表将恒元 E 描写的辫子的下端线, 绕铅垂线转动 360° 后得到的图形. 在研究无限群的不等价不可约表示时, 在中心里恒元以外的元素非常重要, 因为它们在不可约表示中取常数矩阵形式, 这常数可用来标记不可约表示.

讨论一类特殊的 n 线辫子, 它的 n 根线都分别将上下两端线上编号相同的点连接起来, 而在两端线之间这些连线可能有着复杂的交叉. 这样的辫子相乘后仍保持此性质, 逆元和共轭元素也保持此性质. 因此, B_n 群中所有具有这性质的元素集合构成 B_n 群的一个不变子群, 称为纯 (pure) 辫子群 P_n, 它的商群同构于置换群

$$
\mathrm{B}_n/\mathrm{P}_n \approx \mathrm{S}_n \tag{A20.7}
$$

事实上, 在辫子群中, g_a 和 g_a^{-1} 是完全独立的. 如果对它们加上约束条件, 则辫子群可能退化为较简单的无限群, 甚至变成有限群. 例如, 附加约束条件

$$
g_a^{-1} = g_a
$$

即略去了连线的各种复杂交叉的区别, 式 (A20.1) 退化为式 (6.18), 这也就是从辫子群中抹去了纯辫子群, 得到商群, 即置换群. 下一小节是另一个有趣的例子.

二、狄拉克模型

三面墙上各钉一钉子, 由每一个钉子分别引出一根有弹性的线 (橡皮筋), 连到一块木板上的三个钉子上, 这样得到的模型, 如图 A20.5 所示, 称为狄拉克模型 (Dirac game). 当然, 三面墙可以等价地移到上面, 相当无穷长的上端线. 与三线辫子的区别在于下端线变成有限长了. 狄拉克证明, 这样的模型具有类似旋量的性质, 即在不

扯断橡皮筋的条件下, 木板绕铅垂轴转动 720° 后整个系统才恢复原状. 问题的关键在于, 木板线度有限, 橡皮筋可以从木板的下方绕过去, 也就是说, 图 A20.6 等价于恒元. 用辫子群的语言来说, 狄拉克模型的变换群就是加了下面约束的辫子群 B_3

$$g_1g_2g_2g_1 = E\ , \qquad g_2^2 = g_1^{-2}\ , \qquad g_1^2 = g_1^{-2} \tag{A20.8}$$

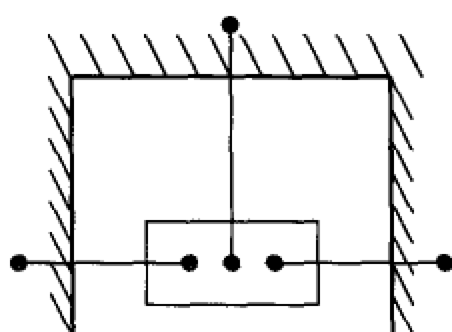


图 A20.5 狄拉克模型

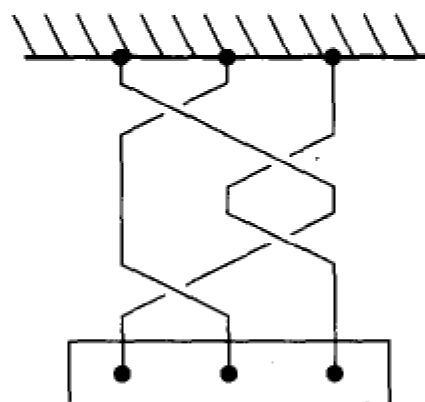


图 A20.6 狄拉克模型的约束

g_1 和 g_2 还要满足基本辫子的关系式 (A20.1), 故有

$$\begin{aligned} g_2^4 &= g_2\left(g_1g_1^{-1}\right)g_1^{-2}\left(g_1^{-1}g_1\right)g_2 = (g_2g_1g_2)g_2^2(g_2g_1g_2) \\ &= (g_1g_2g_1)g_1^{-2}(g_1g_2g_1) = g_1g_2g_2g_1 = E \end{aligned}$$

由此得

$$g_1^2 = g_1^{-2} = g_2^2 = g_2^{-2}\ , \qquad g_1^{-1} = g_1^3\ , \qquad g_2^{-1} = g_2^3 \tag{A20.9}$$

木板绕铅垂方向转动 360° 就是辫子群 B_3 的中心 $\Delta^3 = (g_1g_2)^3$, 它不等于恒元

$$(g_1g_2)(g_1g_2)(g_1g_2) = g_1g_2g_1^2g_2g_1 = g_1^2 \neq E$$

而木板转动 720° 就恢复原状.

约束使狄拉克模型的变换群 G 变成有限群, 它包含 12 个元素. 第二章的习题第 15 题给出了它的乘法表, 其中元素的对应关系如下

$$\begin{aligned} &E = E\ , && g_1 = B\ , && g_2 = C\ , && g_1^{-1} = F, \\ &g_2^{-1} = I, && g_1^2 = A\ , && g_1g_2 = K\ , && g_2g_1 = L, \\ &g_1g_2^{-1} = M\ , && g_2g_1^{-1} = N\ , && g_1g_2g_1^{-1} = D\ , && g_1g_2g_1 = J \end{aligned} \tag{A20.10}$$

三、黑克代数

在辫子群 B_n 的群代数中附加约束条件

$$g_a = \left(1-q^2\right)E + q^2g_a^{-1} \tag{A20.11}$$

其中, q 是一个复数, 而且限制 q 不是单位根, $q^n \neq 1$, 则此代数变成有限维的, 称为黑克 (Hecke) 代数, 记作 $H(q^2, n)$. 作为代数关系, 式 (A20.11) 中的 E 应该改为单位元 $\mathbf{1}$. 约束式 (A20.11) 经常表成下面形式

$$(g_a - \mathbf{1})\left(g_a + q^2\mathbf{1}\right) = 0 \tag{A20.12}$$

注意, 当 q^2 趋于 1 时, 黑克代数退化为置换群的群代数. 由于有此联系, 置换群的某些不连续的性质可能会在黑克代数中得以保留, 某些研究方法可以推广. 推广式 (6.118), 定义 $n-1$ 个算符 H_a

$$H_a = \sum_{d=1}^{a-1} q^{-2(a-d-1)} g_{a-1}g_{a-2}\cdots g_{d+1}g_d g_{d+1}\cdots g_{a-2}g_{a-1}, \quad 2 \leqslant a \leqslant n \tag{A20.13}$$

易见

$$H_{a+1} = g_a + q^{-2} g_a H_a g_a\ , \qquad H_1 = 0 \tag{A20.14}$$

当 $q^2 \to 1$ 时, 有对应关系

$$g_a \to P_a\ , \qquad H_a \to M_a \tag{A20.15}$$

式 (A20.14) 两边左乘 $q^2 g_a^{-1}$, 并用式 (A20.11) 代入, 得

$$g_a H_{a+1} - H_a g_a = \left(1 - q^2\right) H_{a+1} + q^2 E \tag{A20.16}$$

这式子在计算 g_a 的表示矩阵时有用.

类似于式 (6.120), 我们来证明 H_a 也满足一个重要关系

$$g_a H_b = H_b g_a\ , \qquad 若\ \ b \neq a\ \ 或\ \ a+1 \tag{A20.17}$$

证明　由基本辫子的乘积关系式 (A20.1) 知, 当 $b < a$ 时式 (A20.17) 是显然的. 当 $b > a+1$ 时我们将 H_b 按式 (A20.13) 展开, 并逐项检查它们与 g_a 的对易关系. $d > a+1$ 的项与 g_a 对易也是显然的. 对 $d < a$ 的项, 由式 (A20.1) 得

$$\begin{aligned}
& g_a \left\{q^{-2(b-d-1)} g_{b-1}\cdots g_{a+1}g_a\cdots g_d\cdots g_a g_{a+1}\cdots g_{b-1}\right\} \\
&= q^{-2(b-d-1)} g_{b-1}\cdots\left(g_a g_{a+1} g_a\right)\cdots g_d\cdots g_a g_{a+1}\cdots g_{b-1} \\
&= q^{-2(b-d-1)} g_{b-1}\cdots g_{a+1}g_a\cdots g_d\cdots\left(g_{a+1}g_a g_{a+1}\right)\cdots g_{b-1} \\
&= \left\{q^{-2(b-d-1)} g_{b-1}\cdots g_{a+1}g_a\cdots g_d\cdots g_a g_{a+1}\cdots g_{b-1}\right\} g_a
\end{aligned}$$

最后, 把 $d = a+1$ 和 a 两项合起来, 讨论它们与 g_a 的对易关系

$$\begin{aligned}
& g_a \left\{q^{-2(b-a-2)} g_{b-1}\cdots g_{a+1}\cdots g_{b-1} + q^{-2(b-a-1)} g_{b-1}\cdots g_a\cdots g_{b-1}\right\} \\
&= q^{-2(b-a-1)} g_{b-1}\cdots g_{a+2}\left\{g_a\left(q^2 g_{a+1} + g_{a+1}g_a g_{a+1}\right)\right\} g_{a+2}\cdots g_{b-1}
\end{aligned}$$

由于约束式 (A20.11), 有

$$\begin{aligned}&g_a\left\{q^2g_{a+1}+g_{a+1}g_ag_{a+1}\right\}\\&=\left\{\left(g_{a+1}-1+q^2\right)g_{a+1}\right\}g_ag_{a+1}+\left(g_ag_{a+1}g_a\right)\left(1-q^2+q^2g_{a+1}^{-1}\right)\\&=g_{a+1}\left(g_{a+1}g_ag_{a+1}\right)+q^2g_{a+1}g_a\\&=\left\{q^2g_{a+1}+g_{a+1}g_ag_{a+1}\right\}g_a\end{aligned}$$

证完.

因为 H_a 的展开式中只包含下标小于 a 的 g_d, 所以由式 (A20.17) 立刻可得

$$[H_a,\ H_b]=0\ ,\qquad a,b\leqslant n \tag{A20.18}$$

与 M_a 算符类似, 用算符 H_a 集合的共同本征矢量作为黑克代数不可约表示的基. 由于 q 的连续变形, 辫子群 (黑克代数) 可变回置换群, 辫子群的不可约表示 D_q 也可用杨图 $[\lambda]$ 标记, 表示的行和列也可按正则杨表标记和排列, 而且当 $q^2\to 1$ 时, 所有的量都变回到置换群的对应量

$$\begin{aligned}&D_q(H_a)_{\mu\nu}=\delta_{\mu\nu}\ h_\nu(a),\\&h_\nu(a)\to m_\nu(a)\ ,\qquad \text{当}\ \ q^2\to 1\end{aligned} \tag{A20.19}$$

其中, 省略了上标 $[\lambda]$. 此式保证了 H_a 的本征值 $h_\nu(a)$ 是不简并的. 由式 (A20.17) 得

$$D_q(g_a)_{\mu\nu}\left\{h_\mu(b)-h_\nu(b)\right\}=0,\qquad \text{当}\ \ b<a\ \ \text{或}\ \ b>a+1$$

即

$$D_q(g_a)_{\mu\nu}=0\ ,\qquad \text{若}\ \ \mu\neq\nu\ \ \text{或}\ \ \nu_a \tag{A20.20}$$

其中, ν_a 的定义见 6.5 节式 (6.129). 表示矩阵又变成方块矩阵, 分解为一维和二维子矩阵的直和形式. 如果 ν_a 不存在, 即在正则杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 中, a 和 $a+1$ 填在同一行或同一列, 则得一维子矩阵 $D_q(g_a)_{\nu\nu}$. 由约束条件式 (A20.12) 知, 一维子矩阵满足

$$\left\{D_q(g_a)_{\nu\nu}-1\right\}\left\{D_q(g_a)_{\nu\nu}+q^2\right\}=0$$

再考虑式 (A20.14) 和极限条件 (A20.19), 当 a 和 $a+1$ 填在正则杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 的同一行时有

$$D_q(g_a)_{\nu\nu}=1\ ,\qquad h_\nu(a+1)=1+q^{-2}h_\nu(a) \tag{A20.21}$$

当 a 和 $a+1$ 填在正则杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 的同一列时有

$$D_q(g_a)_{\nu\nu}=-q^2\ ,\qquad h_\nu(a+1)=-q^2+q^2h_\nu(a) \tag{A20.22}$$

如果 ν_a 存在, 则 $D_q(g_a)$ 中包含二维子矩阵, 例如选 $\nu < \nu_a$, 子矩阵表为

$$\begin{pmatrix} D_q(g_a)_{\nu\nu} & D_q(g_a)_{\nu\nu_a} \\ D_q(g_a)_{\nu_a\nu} & D_q(g_a)_{\nu_a\nu_a} \end{pmatrix} \tag{A20.23}$$

其中, 行 (和列) 指标为 ν 和 ν_a. 根据极限条件式 (A20.19), 适当选择基, 可使

$$D_q(g_a)_{\nu\nu_a} = D_q(g_a)_{\nu_a\nu} \neq 0 \tag{A20.24}$$

代入式 (A20.16) 得

$$\begin{aligned} &D_q(g_a)_{\nu\nu_a}\{h_{\nu_a}(a+1) - h_\nu(a)\} = 0, \\ &D_q(g_a)_{\nu_a\nu}\{h_\nu(a+1) - h_{\nu_a}(a)\} = 0, \\ &D_q(g_a)_{\nu\nu} = \frac{(1-q^2)h_\nu(a+1)+q^2}{h_\nu(a+1)-h_\nu(a)}, \\ &D_q(g_a)_{\nu_a\nu_a} = \frac{(1-q^2)h_{\nu_a}(a+1)+q^2}{h_{\nu_a}(a+1)-h_{\nu_a}(a)} \end{aligned} \tag{A20.25}$$

由前两式得

$$h_{\nu_a}(a) = h_\nu(a+1)\ , \qquad h_{\nu_a}(a+1) = h_\nu(a) \tag{A20.26}$$

通过数学归纳法可证

$$\begin{aligned} h_\nu(a) &= q^{1-m_\nu(a)}[m_\nu(a)]_q \\ &= \begin{cases} 1 + q^{-2} + q^{-4} + \cdots + q^{-2m_\nu(a)+2}, & \text{当}\ m_\nu(a) > 0 \\ 0, & \text{当}\ m_\nu(a) = 0 \\ -q^2 - q^4 - \cdots - q^{-2m_\nu(a)}, & \text{当}\ m_\nu(a) < 0 \end{cases} \end{aligned} \tag{A20.27}$$

其中, “q 数” $[m]_q$ 定义如下

$$\begin{aligned} &[m]_q \equiv \frac{q^m - q^{-m}}{q - q^{-1}} \ \xrightarrow{q\to 1}\ m, \\ &[0]_q = 0\ , \qquad [1]_q = 1\ , \qquad [-m]_q = -[m]_q, \\ &[m]_q \neq 0\ , \quad \text{当}\ m \neq 0 \end{aligned} \tag{A20.28}$$

最后一式用到了 q 不是单位根的条件.

证明　取 $h_\nu(1) = 0$. 当 $a = 2$ 时, $m_\nu(2)$ 等于 1 或 -1, 式 (A20.27) 符合于式 (A20.21) 和 (A20.22). 假定式 (A20.27) 对 $1 \leqslant a \leqslant b$ 都成立, 我们需要证明 $h_\nu(b+1)$ 也满足式 (A20.27) . 如果在正则杨表 $\mathcal{Y}_\nu$ 中, $b+1$ 和 b 填在同一行或同一列, 则 $m_\nu(b) - m_\nu(b+1) = -1$(同一行) 或 1(同一列), 式 (A20.21) 和 (A20.22) 保证 $h_\nu(b+1)$ 满足式 (A20.27). 对其他情况, 由于式 (A20.26) 和 (6.129), 有

$$h_\nu(b+1) = h_{\nu_a}(b) = q^{1-m_\nu(b+1)}\,[m_\nu(b+1)]_q$$

证完.

不失普遍性, 设 $\nu < \nu_a$, 令

$$m \equiv m_\nu(a) - m_\nu(a+1) > 1 \tag{A20.29}$$

把式 (A20.27) 代入式 (A20.25), 分两种情况计算 $D_q(g_a)_{\nu\nu}$:

(1) $m_\nu(a) > m_\nu(a+1) \geqslant 0$

$$\begin{aligned} D_q(g_a)_{\nu\nu} &= \frac{q^{-2m_\nu(a+1)+2}}{-q^{-2m_\nu(a+1)} - q^{-2m_\nu(a+1)-2} - \cdots - q^{-2m_\nu(a)+2}} \\ &= \frac{-q^2}{1+q^{-2}+q^{-4}+\cdots+q^{-2m_\nu(a)+2m_\nu(a+1)+2}} \\ &= \frac{1-q^2}{1-q^{-2m_\nu(a)+2m_\nu(a+1)}} \\ &= -\frac{q^{m_\nu(a)-m_\nu(a+1)+1}}{[m_\nu(a)-m_\nu(a+1)]_q} = -q^{m+1}/[m]_q \end{aligned}$$

(2) $m_\nu(a+1) < 0$

$$\begin{aligned} D_q(g_a)_{\nu\nu} &= \frac{-q^{-2m_\nu(a+1)+2}}{q^{-2m_\nu(a)+2} + q^{-2m_\nu(a)+4} + \cdots + q^{-2m_\nu(a+1)}} \\ &= -q^{m+1}/[m]_q \end{aligned}$$

两种情况结果相同. $D_q(g_a)_{\nu_a\nu_a}$ 也可同法计算, 如利用约束条件

$$D_q(g_a)^2 = (1-q^2)D_q(g_a) + q^2\mathbf{1}$$

计算更简便. 上式取 ν 行 ν_a 列元素, 消去公共因子 $D_q(g_a)_{\nu\nu_a}$, 得

$$D_q(g_a)_{\nu_a\nu_a} = -D_q(g_a)_{\nu\nu} + (1-q^2) = \frac{q^{m+1} - q\left(q^m - q^{-m}\right)}{[m]_q} = \frac{q^{-m+1}}{[m]_q}$$

再取 ν 行 ν 列元素, 得

$$\begin{aligned} D_q(g_a)^2_{\nu\nu_a} &= -D_q(g_a)^2_{\nu\nu} + (1-q^2)D_q(g_a)_{\nu\nu} + q^2 \\ &= \frac{q^2}{\left(q^m - q^{-m}\right)^2}\left\{-q^{2m}\left(q-q^{-1}\right)^2 + \left(q-q^{-1}\right)^2 q^m\left(q^m - q^{-m}\right) + \left(q^m - q^{-m}\right)^2\right\} \\ &= \frac{q^2}{\left(q^m - q^{-m}\right)^2}\left\{-q^2 - q^{-2} + q^{2m} + q^{-2m}\right\} = \frac{q^2[m+1]_q[m-1]_q}{[m]_q^2} \end{aligned}$$

因此, $D_q(g_a)$ 包含的 2×2 子矩阵式 (A20.23) 为

$$\frac{q}{[m]_q}\begin{pmatrix} -q^m & \{[m+1]_q[m-1]_q\}^{1/2} \\ \{[m+1]_q[m-1]_q\}^{1/2} & q^{-m} \end{pmatrix} \tag{A20.30}$$

总之，加了约束条件 (A20.11) 后，辫子群 B_n 的群代数简化为黑克代数，它的有限维不可约表示可用杨图 $[\lambda]$ 标记，表示的行 (列) 用正则杨表标记和排列. 表示矩阵 $D_q(g_a)$ 是若干个 1×1 和 2×2 子矩阵的直和，这些子矩阵分别由式 (A20.21)、(A20.22) 和 (A20.30) 给出. 当然这样的表示也是辫子群 B_n 的表示. 当 $q\to 1$ 时，这表示退化为置换群 S_n 的用同一杨图 $[\lambda]$ 标记的不可约表示.

四、辫子群的有限维表示

对不附加任何约束条件的辫子群 B_n，有限维表示问题还没有得到普遍的解决. 这里只是介绍一点思路.

辫子群的生成元取为 Δ, Ω 及其逆元，它们和辫子群的中心 $\Delta^n = \Omega^{n-1}$ 存在幂次关系. 在辫子群不可约表示中，中心的表示矩阵必为常数矩阵，非零常数记作 λ. 选择表象，使 Δ 是对角化的，Ω 则可通过相似变换 Z 对角化，于是我们得到辫子群 B_n 有限维不可约表示的一般形式

$$D^\lambda(\Delta^n) = \lambda \mathbf{1}\ , \qquad D^\lambda(\Delta) = \lambda^{1/n}\Gamma_1\ , \qquad D^\lambda(\Omega) = \lambda^{1/(n-1)} Z\Gamma_2 Z^{-1} \qquad \text{(A20.31)}$$

其中，Γ_1 和 Γ_2 是两个非常数对角矩阵，对角元只能分别取 ω 和 τ 的幂次

$$\omega = \exp\{-\mathrm{i}2\pi/n\}\ , \qquad \tau = \exp\{-\mathrm{i}2\pi/(n-1)\} \qquad \text{(A20.32)}$$

Z 是非奇相似变换矩阵，由式 (A20.1) 和 (A20.6)，它还要满足相容条件

$$\begin{aligned}
&(Z\Gamma_2Z^{-1})^2\Gamma_1^{-2}(Z\Gamma_2Z^{-1}) = \Gamma_1(Z\Gamma_2Z^{-1})\Gamma_1^{-2}(Z\Gamma_2Z^{-1})^2\Gamma_1^{-1},\\
&(Z\Gamma_2Z^{-1})\Gamma_1^{a-2}(Z\Gamma_2Z^{-1}) = \Gamma_1^{a-1}(Z\Gamma_2Z^{-1})\Gamma_1^{-a}(Z\Gamma_2Z^{-1})\Gamma_1^{a-1}, \qquad \text{(A20.33)}\\
&3\leqslant a\leqslant n-1
\end{aligned}$$

这些条件并不完全独立. 辫子群 B_n 的不可约表示 $D^\lambda(B_n)$ 依赖于 λ, Γ_1, Γ_2 和 Z 矩阵. 进一步的分类还有待研究.

附录 21　第七章定理一的解释

若 $\det g = 0$，则可在实李代数中选取适当的实参数，使 g_{AB} 对角化，而且至少有一个对角元为零. 例如 $g_{11}=0$，其他 $g_{BB}\neq 0$. 则由式 (7.20) 得

$$0 = C_{AB1} = C_{1AB} = C_{1A}^{\ \ B} g_{BB}\ , \qquad C_{1A}^{\ \ B} = 0$$

即

$$[I_1,\ I_A] = \mathrm{i}C_{1A}^{\ \ 1} I_1$$

由 I_1 架设的子李代数是阿贝尔理想. 当有 n 个对角元 $g_{AA}=0$ 时, 相应子李代数是可解李代数, 当然还是存在阿贝尔理想, 证明需要更多的数学知识, 这里从略.

反之, 如果李代数的实形存在阿贝尔理想, 选择参数, 使属于理想的参数用 a, b 等标记, 其余参数用 j, k 等标记, A, B 等同时标记两类参数, 则

$$\begin{aligned} &[I_a,\ I_b]=0\ , &&C_{ab}{}^{A}=0,\\ &[I_a,\ I_j]=\mathrm{i}\sum_b C_{aj}{}^{b}I_b\ , &&C_{aj}{}^{k}=0 \end{aligned}$$

因此

$$g_{aB}=\sum_{PQ} C_{aP}{}^{Q}C_{BQ}{}^{P}=\sum_{bj} C_{aj}{}^{b}C_{Bb}{}^{j}=0$$

即 $\det g=0$.

对紧致实李代数, 式 (4.125) 已经证明, 可以选到一组实参数, 使结构常数关于三个指标是完全反对称的

$$C_{AB}{}^{D}=-C_{BA}{}^{D}=-C_{AD}{}^{B}$$

若再找实正交变换 X, 将 g_{AB} 对角化, 则对角元为非正

$$\begin{aligned} g'_{AA}\ &=\sum_{PQ}\sum_{BD} X_{AB}\left(C_{BP}{}^{Q}C_{DQ}{}^{P}\right)X_{AD}\\ &=-\sum_{PQ}\left(\sum_{D} X_{AD}C_{DP}{}^{Q}\right)^2\leqslant 0 \end{aligned}$$

若此实李代数又是半单的, 则 $g'_{AA}<0$, 即 g_{AB} 负定. 反之, 若 g_{AB} 负定, 则可选择实参数, 使 $g_{AB}=-\delta_{AB}$, $C_{AB}{}^{D}=-C_{ABD}$ 是完全反对称的, 伴随表示化成了实正交表示, 此实李代数是紧致的.

附录 22　半单李代数的卡西米尔算子

半单李代数的基林型非奇, 因而存在 g_{AB} 的逆矩阵 g^{AB}, 它也是对称矩阵, 满足式 (7.23). g_{AB} 和 g^{AB} 相当于度规张量, 可以用来升降指标.

由生成元的 n 次齐次多项式构成的, 可与所有生成元对易的算子, 称为 n 阶卡西米尔算子 C_n. 在不可约表示中卡西米尔算子取常数矩阵, 此常数称为卡西米尔不变量. 下面将证明半单李代数的 n 阶卡西米尔算子 C_n 为

$$\begin{aligned} C_n\ &=\sum_{(D)}\sum_{(A)}\sum_{(B)} C_{A_1D_1}{}^{D_2}C_{A_2D_2}{}^{D_3}\cdots C_{A_nD_n}{}^{D_1}\\ &\quad\times g^{A_1B_1}\cdots g^{A_nB_n}I_{B_1}I_{B_2}\cdots I_{B_n} \end{aligned}\tag{A22.1}$$

例如, 二阶卡西米尔算子为

$$C_2 = \sum_{D_1 D_2} \sum_{A_1 A_2} \sum_{B_1 B_2} C_{A_1 D_1}{}^{D_2} C_{A_2 D_2}{}^{D_1} g^{A_1 B_1} g^{A_2 B_2} I_{B_1} I_{B_2} = \sum_{B_1 B_2} g^{B_1 B_2} I_{B_1} I_{B_2} \tag{A22.2}$$

现在来证明, C_n 与每一个生成元 I_Q 对易.

$$\begin{aligned}[I_{B_1} I_{B_2} \cdots I_{B_n},\ I_Q] &= \sum_{a=1}^{n} I_{B_1} \cdots I_{B_{a-1}} [I_{B_a},\ I_Q]\, I_{B_{a+1}} \cdots I_n \\ &= \mathrm{i} \sum_{a=1}^{n} \sum_{P} C_{B_a Q}{}^{P} I_{B_1} \cdots I_{B_{a-1}} I_P I_{B_{a+1}} \cdots I_n\end{aligned}$$

交换求和指标 B_a 和 P, 再把与 A_a 和 P 有关的部分提出来

$$\begin{aligned}\sum_{A_a P} C_{A_a D_a}{}^{D_{a+1}} C_{PQ}{}^{B_a} g^{A_a P} &= \sum_{A_a P D} C_{A_a D_a}{}^{D_{a+1}} C_{PQD} g^{DB_a} g^{A_a P} \\ = \sum_{A_a D} & C_{A_a D_a}{}^{D_{a+1}} C_{QD}{}^{A_a} g^{DB_a} \\ = \sum_{A_a D} & \left\{ C_{QA_a}{}^{D_{a+1}} C_{DD_a}{}^{A_a} - C_{DA_a}{}^{D_{a+1}} C_{QD_a}{}^{A_a} \right\} g^{DB_a} \\ = \sum_{DA_a} & \left\{ C_{QD}{}^{D_{a+1}} C_{A_a D_a}{}^{D} - C_{A_a D}{}^{D_{a+1}} C_{QD_a}{}^{D} \right\} g^{A_a B_a}\end{aligned}$$

最后一步交换了求和指标 D 和 A_a. 由此得

$$\begin{aligned}[C_n,\ I_Q] &= \mathrm{i} \sum_{a=1}^{n} \sum_{D(D)} \sum_{(A)} \sum_{(B)} C_{A_1 D_1}{}^{D_2} \cdots C_{A_{a-1} D_{a-1}}{}^{D_a} \\ &\quad \times \left(C_{A_a D_a}{}^{D} C_{QD}{}^{D_{a+1}} - C_{QD_a}{}^{D} C_{A_a D}{}^{D_{a+1}} \right) \\ &\quad \times C_{A_{a+1} D_{a+1}}{}^{D_{a+2}} \cdots C_{A_n D_n}{}^{D_1} g^{A_1 B_1} \cdots g^{A_n B_n} I_{B_1} I_{B_2} \cdots I_{B_n} \\ &= 0\end{aligned}$$

相减的两项对 a 求和后互相抵消.

由式 (7.19) 知, 当把紧致半单实李代数的基林型化为常数矩阵后, 此常数正是伴随表示的二阶卡西米尔不变量. 对 SU(N) 群和 SO(N) 群, 7.4 节的方式选择实参数后, 基林型为

$$\begin{aligned}&\mathrm{SU}(N)\ 群 \qquad g_{AB} = -\delta_{AB} N \\ &\mathrm{SO}(N)\ 群 \qquad g_{AB} = -\delta_{AB} 2(N-2)\end{aligned} \tag{A22.3}$$

附录 23 半单李代数的紧致实形

对复的半单李代数, $\det(g_{jk}) \neq 0$, 可通过选择参数, 即将 H_j 做适当的线性组合, 使

$$\langle H_j | H_k \rangle = -g_{jk} = \delta_{jk} \tag{A23.1}$$

在保持 $-g_{jk}$ 不变的条件下, H_j 还允许作任意正交变换. H_j 作正交变换也就是根作正交变换. 我们先来证明, 可以找到适当的正交变换, 使所有根都变成实根. 既然度规是 $-g_{jk}=\delta_{jk}$, 实的根空间就是实欧几里得空间.

证明分两步走. 任取 ℓ 个线性无关的根 $\boldsymbol{\alpha}^{(j)}$, 其他根都可表为它们的线性组合. 先证 ℓ 个根 $\boldsymbol{\alpha}^{(j)}$ 可通过正交变换化为实根, 再证其他根关于这些实根的展开系数都是实数.

因为度规 $-g_{jk}=\delta_{jk}$, 所以矢量的模就是矢量各分量的平方和, 两矢量内积就是两矢量对应分量乘积之和. 根据定理三推论二, 根矢量 $\boldsymbol{\alpha}^{(1)}$ 的模是正实数, 因而由 $\boldsymbol{\alpha}^{(1)}$ 各分量的实部构成的实矢量不是零矢量, 可通过实正交变换把这实矢量的第一分量变为正的, 记作 a, 其余分量都为零. 正因为根矢量 $\boldsymbol{\alpha}^{(1)}$ 的模是正实数, 它的第一分量虚部只能为零. 再把变换后的 $\boldsymbol{\alpha}^{(1)}$ 各分量的虚部, 去掉 i 后, 看作一个实矢量, 可通过后 $\ell-1$ 维空间的实正交变换, 保持第一分量为零, 把第二分量变为非负, 记作 b, 其余分量都为零. 经过这两次变换, $\boldsymbol{\alpha}^{(1)}$ 的前两分量分别为 a 和 $\mathrm{i}b$, 其余分量都为零, 且 $0\leqslant b<a$. 再在前两维子空间中作如下正交变换, 其余分量保持不变, 而前两分量变成

$$\left(a^2-b^2\right)^{-1/2}\begin{pmatrix} a & \mathrm{i}b \\ -\mathrm{i}b & a \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ \mathrm{i}b \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \left(a^2-b^2\right)^{1/2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

这样, 根矢量 $\boldsymbol{\alpha}^{(1)}$ 变成实矢量, 且只有第一分量是正实数, 记作 $a_1>0$, 其余分量全为零. 根据定理三推论二, 其余根矢量 $\boldsymbol{\alpha}^{(j)}$ 与 $\boldsymbol{\alpha}^{(1)}$ 的内积是实数, 因而其余根矢量的第一分量都是实数. 设 $\boldsymbol{\alpha}^{(2)}$ 的第一分量为实数 a_2, $\boldsymbol{V}^{(2)}=\boldsymbol{\alpha}^{(2)}-(a_2/a_1)\boldsymbol{\alpha}^{(1)}$, 则 $\boldsymbol{V}^{(2)}$ 的第一分量为零. 进一步, 保持 $\boldsymbol{V}^{(2)}$ 的第一分量不变, 在余下的 $\ell-1$ 维空间作正交变换, 重复前面做法, 可使矢量 $\boldsymbol{V}^{(2)}$ 的第一分量为零, 第二分量是不为零的正实数, 其余分量都为零. 这时根矢量 $\boldsymbol{\alpha}^{(2)}$ 也是实矢量, 只有前两分量不为零. 根据定理三推论二, 所有余下的根矢量 $\boldsymbol{\alpha}^{(j)}$ 的第一和第二分量都是实数. 依此方法做下去, 可通过一系列正交变换, 使 ℓ 个根矢量 $\boldsymbol{\alpha}^{(j)}$ 都变成实矢量.

其次, 余下的任意根 $\boldsymbol{\beta}$ 可按实根 $\boldsymbol{\alpha}^{(j)}$ 展开, 设 $\boldsymbol{\beta}=\sum_j x_j\boldsymbol{\alpha}^{(j)}$, 等式两边都与 2 $2\boldsymbol{\alpha}^{(k)}/\left(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}\cdot\boldsymbol{\alpha}^{(k)}\right)$ 取内积, 得

$$\Gamma\left(\boldsymbol{\beta}/\boldsymbol{\alpha}^{(k)}\right)=\sum_{j=1}^{\ell} x_j\Gamma\left(\boldsymbol{\alpha}^{(j)}/\boldsymbol{\alpha}^{(k)}\right) \tag{A23.2}$$

此式是关于 ℓ 个变量 x_j 的线性联立方程. 由于 $\boldsymbol{\alpha}^{(j)}$ 是线性无关的, 方程的系数行列式不为零, 存在唯一解 x_j. 这当然是意料之中的. 既然联立方程 (A23.2) 的所有系数都是整数, 解 x_j 必是有理数. 证完.

现在我们已经选择了适当的参数, 即选择了正则基 H_j 和 $E_{\boldsymbol{\alpha}}$, 使 ℓ 秩半单李代

数中的所有根矢量都是实矢量，基林型取如下简单形式

$$g_{jk} = -\delta_{jk}\ , \qquad g_{\boldsymbol{\alpha\beta}} = -\delta_{(-\boldsymbol{\alpha})\boldsymbol{\beta}}\ , \qquad g_{j\boldsymbol{\alpha}} = 0 \tag{A23.3}$$

值得注意的是，式 (A23.3) 还没有完全限定基 $E_{\boldsymbol{\alpha}}$. $E_{\boldsymbol{\alpha}}$ 是作为 H_j 的本征矢量来定义的，它允许乘任意系数 $b_{\boldsymbol{\alpha}}$. 条件 $g_{\boldsymbol{\alpha}(-\boldsymbol{\alpha})} = -1$ 对 $b_{\boldsymbol{\alpha}}$ 加上了限制，但还允许系数在满足 $b_{\boldsymbol{\alpha}}b_{-\boldsymbol{\alpha}} = 1$ 的条件下做进一步选择，即系数比 $b_{\boldsymbol{\alpha}}/b_{-\boldsymbol{\alpha}}$ 还允许做任意选择.

类似于 SO(3) 群中的 $T_{\pm}$ 和 T_1, T_2 之间的组合，令

$$E_{\boldsymbol{\alpha}1} = \left(E_{\boldsymbol{\alpha}} + E_{-\boldsymbol{\alpha}}\right)/\sqrt{2}\ , \qquad E_{\boldsymbol{\alpha}2} = -\mathrm{i}\left(E_{\boldsymbol{\alpha}} - E_{-\boldsymbol{\alpha}}\right)/\sqrt{2} \tag{A23.4}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\mathrm{i} & \mathrm{i} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & -\mathrm{i} \\ 1 & \mathrm{i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

可以使基林型变成 $-\mathbf{1}$，但不能保证结构常数都变成实数. 可以证明，只有选择系数比 $b_{\boldsymbol{\alpha}}/b_{-\boldsymbol{\alpha}}$ 使下式都成立

$$N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} = -N_{-\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{\beta}} \tag{A23.5}$$

才能保证结构常数同时变成实数. 如果此时参数都是实数，则此半单李代数是紧致实形. 这就是第七章定理五.

证明 根据式 (7.53)，$N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}$ 和 $N_{-\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{\beta}}$ 的乘积是负实数，因而条件式 (A23.5) 使 $N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}$ 都是实数.

变换式 (A23.4) 对 H_j 之间的对易关系式 (7.30) 没有影响. H_j 和 $E_{\boldsymbol{\alpha}}$ 的对易关系式 (7.31) 变成

$$\begin{aligned} &[H_j,\ E_{\boldsymbol{\alpha}1}] = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha_j E_{\boldsymbol{\alpha}} - \alpha_j E_{-\boldsymbol{\alpha}}\right) = \mathrm{i}\alpha_j E_{\boldsymbol{\alpha}2}\ , \qquad C_{j(\boldsymbol{\alpha}1)}^{\ (\boldsymbol{\alpha}2)} = \alpha_j \\ &[H_j,\ E_{\boldsymbol{\alpha}2}] = \frac{-\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\left(\alpha_j E_{\boldsymbol{\alpha}} + \alpha_j E_{-\boldsymbol{\alpha}}\right) = -\mathrm{i}\alpha_j E_{\boldsymbol{\alpha}1}\ , \qquad C_{j(\boldsymbol{\alpha}2)}^{\ (\boldsymbol{\alpha}1)} = -\alpha_j \end{aligned} \tag{A23.6}$$

结构常数是实数. $E_{\boldsymbol{\alpha}}$ 之间的对易关系式 (7.42) 分三种情况. 当 $\boldsymbol{\alpha}\pm\boldsymbol{\beta}$ 不是根时，组合 (A23.4) 不影响对易关系. 当 $\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\beta}$ 时

$$[E_{\boldsymbol{\alpha}1},\ E_{\boldsymbol{\alpha}2}] = \mathrm{i}\left[E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{-\boldsymbol{\alpha}}\right] = \mathrm{i}H_{\boldsymbol{\alpha}}\ , \qquad C_{(\boldsymbol{\alpha}1)(\boldsymbol{\alpha}2)}^{\qquad\ \ j} = \alpha_j \tag{A23.7}$$

我们看到结构常数对三个指标完全反对称. 当 $\boldsymbol{\alpha}\neq\boldsymbol{\beta}$，且 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$ 和 (或)$\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}$ 是根

时, 不失普遍性, 可设 $\boldsymbol{\alpha}\pm\boldsymbol{\beta}$ 是正根, 则

$$
\begin{aligned}
\left[E_{\boldsymbol{\alpha}1},\ E_{\boldsymbol{\beta}1}\right] &= \frac{1}{2}\left\{\left[E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{\boldsymbol{\beta}}\right]+\left[E_{-\boldsymbol{\alpha}},\ E_{-\boldsymbol{\beta}}\right]+\left[E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{-\boldsymbol{\beta}}\right]+\left[E_{-\boldsymbol{\alpha}},\ E_{\boldsymbol{\beta}}\right]\right\}\\
&= \mathrm{i}\sqrt{1/2}N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}E_{(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta})2}+\mathrm{i}\sqrt{1/2}N_{\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{\beta}}E_{(\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta})2},\\
\left[E_{\boldsymbol{\alpha}2},\ E_{\boldsymbol{\beta}2}\right] &= \frac{-1}{2}\left\{\left[E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{\boldsymbol{\beta}}\right]+\left[E_{-\boldsymbol{\alpha}},\ E_{-\boldsymbol{\beta}}\right]-\left[E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{-\boldsymbol{\beta}}\right]-\left[E_{-\boldsymbol{\alpha}},\ E_{\boldsymbol{\beta}}\right]\right\}\\
&= -\mathrm{i}\sqrt{1/2}N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}E_{(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta})2}+\mathrm{i}\sqrt{1/2}N_{\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{\beta}}E_{(\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta})2},\\
\left[E_{\boldsymbol{\alpha}1},\ E_{\boldsymbol{\beta}2}\right] &= \frac{-\mathrm{i}}{2}\left\{\left[E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{\boldsymbol{\beta}}\right]-\left[E_{-\boldsymbol{\alpha}},\ E_{-\boldsymbol{\beta}}\right]-\left[E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{-\boldsymbol{\beta}}\right]+\left[E_{-\boldsymbol{\alpha}},\ E_{\boldsymbol{\beta}}\right]\right\}\\
&= -\mathrm{i}\sqrt{1/2}N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}E_{(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta})1}+\mathrm{i}\sqrt{1/2}N_{\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{\beta}}E_{(\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta})1},\\
\left[E_{\boldsymbol{\alpha}2},\ E_{\boldsymbol{\beta}1}\right] &= \frac{-\mathrm{i}}{2}\left\{\left[E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{\boldsymbol{\beta}}\right]-\left[E_{-\boldsymbol{\alpha}},\ E_{-\boldsymbol{\beta}}\right]+\left[E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{-\boldsymbol{\beta}}\right]-\left[E_{-\boldsymbol{\alpha}},\ E_{\boldsymbol{\beta}}\right]\right\}\\
&= -\mathrm{i}\sqrt{1/2}N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}E_{(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta})1}-\mathrm{i}\sqrt{1/2}N_{\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{\beta}}E_{(\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta})1}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&C_{(\boldsymbol{\alpha}1)(\boldsymbol{\beta}1)}^{(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta})2}=-C_{(\boldsymbol{\alpha}2)(\boldsymbol{\beta}2)}^{(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta})2}=-C_{(\boldsymbol{\alpha}1)(\boldsymbol{\beta}2)}^{(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta})1}=-C_{(\boldsymbol{\alpha}2)(\boldsymbol{\beta}1)}^{(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta})1}=\sqrt{1/2}N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}},\\
&C_{(\boldsymbol{\alpha}1)(\boldsymbol{\beta}1)}^{(\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta})2}=C_{(\boldsymbol{\alpha}2)(\boldsymbol{\beta}2)}^{(\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta})2}=C_{(\boldsymbol{\alpha}1)(\boldsymbol{\beta}2)}^{(\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta})1}=-C_{(\boldsymbol{\alpha}2)(\boldsymbol{\beta}1)}^{(\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta})1}=\sqrt{1/2}N_{\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{\beta}}
\end{aligned}
\tag{A23.8}
$$

若 $\boldsymbol{\alpha}\pm\boldsymbol{\beta}$ 中有一个不是根, 可取相应系数 $N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}$ 或 $N_{\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{\beta}}$ 为零, 结构常数仍都是实数. 证完.

最后, 概略说明如何选取系数比 $b_{\boldsymbol{\alpha}}/b_{-\boldsymbol{\alpha}}$, 使式 (A23.5) 成立. 由于正则对易关系式 (7.42), $b_{\boldsymbol{\alpha}}$ 的改变引起 $N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}$ 的变化为

$$
\frac{N'_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}}{N'_{-\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{\beta}}}=\frac{b_{\boldsymbol{\alpha}}}{b_{-\boldsymbol{\alpha}}}\,\frac{b_{\boldsymbol{\beta}}}{b_{-\boldsymbol{\beta}}}\,\frac{b_{-\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}}}{b_{\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}}}\,\frac{N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}}{N_{-\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{\beta}}}\tag{A23.9}
$$

由素根出发, 逐级选择各正根的系数比 $b_{\boldsymbol{\alpha}}/b_{-\boldsymbol{\alpha}}$. 素根是一级正根, 它的系数比可任意选定, 不影响生成元的对易关系, 因而这不同选择对应的李代数是同构的.

二级正根是两个素根之和, 根据式 (A23.9), 选择它的系数比, 可使式 (A23.5) 成立. 当 $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$ 和 $\boldsymbol{\gamma}=\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$ 都是根时, 由 $N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}=-N_{-\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{\beta}}$, 利用式 (7.55), 可以推出

$$
N_{-\boldsymbol{\gamma},\boldsymbol{\alpha}}=N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}=-N_{-\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{\beta}}=N_{-\boldsymbol{\beta},-\boldsymbol{\alpha}}=N_{-\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\gamma}}=-N_{\boldsymbol{\gamma},-\boldsymbol{\alpha}}\tag{A23.10}
$$

因此我们不必讨论下标分别是正根和负根的系数 $N_{\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{\beta}}$, 它们会自动满足式 (A23.5).

现设 n 级正根的系数比已选定, 对应的式 (A23.5) 都成立. $n+1$ 级正根 $\boldsymbol{\gamma}$ 是 n 级正根 $\boldsymbol{\alpha}$ 与素根 $\boldsymbol{r}$ 之和, 选取 $E_{\boldsymbol{\gamma}}$ 的系数比, 使

$$
N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{r}}=-N_{-\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{r}}\tag{A23.11}
$$

问题是, 若有

$$
\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{r}=\boldsymbol{\gamma}=\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{r}'\tag{A23.12}
$$

由于 E_{γ} 的系数比已经选定, 此时能否保证

$$N_{\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{r}'} = -N_{-\boldsymbol{\beta},-\boldsymbol{r}'} \tag{A23.13}$$

下面证明用到素根之差不是根和式 (7.26)

$$\begin{aligned} N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{r}}N_{-\boldsymbol{\beta},-\boldsymbol{r}'} &= N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{r}}N_{-\boldsymbol{\beta},-\boldsymbol{r}'}\langle E_{\boldsymbol{\gamma}}|E_{-\boldsymbol{\gamma}}\rangle = \langle [E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{\boldsymbol{r}}]\,\big|[E_{-\boldsymbol{\beta}},\ E_{-\boldsymbol{r}'}]\rangle \\ &= -\langle [[E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{\boldsymbol{r}}],\ E_{-\boldsymbol{r}'}]\,|E_{-\boldsymbol{\beta}}\rangle \\ &= \langle [[E_{\boldsymbol{r}},\ E_{-\boldsymbol{r}'}],\ E_{\boldsymbol{\alpha}}]\,|E_{-\boldsymbol{\beta}}\rangle + \langle [[E_{-\boldsymbol{r}'},\ E_{\boldsymbol{\alpha}}],\ E_{\boldsymbol{r}}]\,|E_{-\boldsymbol{\beta}}\rangle \\ &= \langle [E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{-\boldsymbol{r}'}]\,\big|[E_{-\boldsymbol{\beta}},\ E_{\boldsymbol{r}}]\rangle = N_{\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{r}'}N_{-\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{r}} \end{aligned} \tag{A23.14}$$

等式左面不等于零, 因此 $\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{r}$ 也是根. 利用式 (A23.10) 可以证得式 (A23.12)

$$N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{r}}N_{-\boldsymbol{\beta},-\boldsymbol{r}'} = N_{\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{r}'}N_{-\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{r}} = N_{-\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{r}'}N_{\boldsymbol{\beta},-\boldsymbol{r}} = N_{-\boldsymbol{\alpha},-\boldsymbol{r}}N_{\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{r}'} \tag{A23.15}$$

最后一步又用到式 (A23.14). 对于式 (A23.5) 中 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 都不是素根的情况, 可以用把它们分解成素根和的办法来证, 在分解式中出现的系数 $N_{\boldsymbol{\gamma},\boldsymbol{r}}$ 都已满足式 (A23.11), 保证了 $N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}$ 满足式 (A23.5). 证完. 现在系数 $b_{\boldsymbol{\alpha}}$ 和 $b_{-\boldsymbol{\alpha}}$ 还可同时改负号, 这对应 $N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}$ 的符号的选择, 这种变化对应同构的紧致实李代数.

附录 24　SU(3) 群的李代数

为了增加直观性, 计算 SU(3) 群李代数的嘉当 – 外尔基, 素根和根矢量. SU(3) 群是三维幺模幺正矩阵集合按矩阵乘积构成的群. 任意群元素 u 通过幺正相似变换对角化后, 可表为

$$u = \exp\left\{-\mathrm{i}\sum_{a=1}^{8}\ \omega_a T_a\right\}, \tag{A24.1}$$

$$\begin{aligned} &T_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_4 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ &T_5 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & 0 & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_6 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_7 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \\ &T_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_8 = \frac{1}{2\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{A24.2}$$

这组矩阵称为盖尔曼 (Gell-Mann) 矩阵. SU(3) 群的阶数为 8, 秩为 2. 在李代数中有两个生成元可以互相对易, 它们架设嘉当子代数

$$H_1 = T_8, \qquad H_2 = T_3 \tag{A24.3}$$

其他生成元组合为

$$\begin{aligned} &E_{\pm\boldsymbol{\alpha}} = (T_1 \pm \mathrm{i}T_2)/\sqrt{2}\,, &&\boldsymbol{\alpha} = (0,\ 1), \\ &E_{\pm\boldsymbol{\beta}} = (T_4 \pm \mathrm{i}T_5)/\sqrt{2}\,, &&\boldsymbol{\beta} = (\sqrt{3}/2,\ 1/2), \\ &E_{\pm\boldsymbol{\gamma}} = (T_6 \pm \mathrm{i}T_7)/\sqrt{2}\,, &&\boldsymbol{\gamma} = (\sqrt{3}/2,\ -1/2), \end{aligned} \tag{A24.4}$$

其中, $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\gamma}$ 是素根

$$\begin{gathered} \boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\gamma}=\boldsymbol{\beta}\,, \qquad \left[E_{\boldsymbol{\alpha}},\ E_{\boldsymbol{\gamma}}\right] = E_{\boldsymbol{\beta}}/\sqrt{2} \\ N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\gamma}} = N_{\boldsymbol{\gamma},-\boldsymbol{\beta}} = N_{-\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha}} = N_{-\boldsymbol{\gamma},-\boldsymbol{\alpha}} = N_{-\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} = N_{\boldsymbol{\beta},-\boldsymbol{\gamma}} = \sqrt{1/2} \end{gathered} \tag{A24.5}$$

根的模平方为 1, $N_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\gamma}}$ 的数值符合式 (7.53). 基林型为

$$\begin{aligned} &g_{jk} = -2\alpha_j\alpha_k - 2\beta_j\beta_k - 2\gamma_j\gamma_k = -3\delta_{jk}, \\ &g_{11} = 0 - 3/2 - 3/2 = -3\,, \qquad g_{22} = -2 - 1/2 - 1/2 = -3\,, \\ &g_{12} = -1/2 + 1/2 = 0 \end{aligned} \tag{A24.6}$$

附录 23 指出, 对应素根的生成元的系数比 $b_{\boldsymbol{\alpha}}/b_{-\boldsymbol{\alpha}}$ 可以任选, 然后对应正根生成元的系数比以它们为基础来选定, 前者的不同选择不影响结构常数, 因而对应同构的李代数. 现在我们以 SU(3) 群为例来说明. 把 $E_{\boldsymbol{\alpha}}$ 乘 3, $E_{-\boldsymbol{\alpha}}$ 除 3. 为了满足式 (A23.6), $E_{\boldsymbol{\beta}}$ 也要乘 3, $E_{-\boldsymbol{\beta}}$ 要除 3. 这样, 在 SU(3) 群自身表示中, 有四个生成元保持原样, 另四个生成元如下式所示

$$T_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 3 & 0 \\ 1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad T_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i}3 & 0 \\ \mathrm{i}/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$T_4 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1/3 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad T_5 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & -\mathrm{i}3 \\ 0 & 0 & 0 \\ \mathrm{i}/3 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

很明显, 所有对易关系都保持不变. 与原来表象相比, 只是相差一个对角的相似变换

$$X = \mathrm{diag}\left\{3,\ 1,\ 1\right\} \tag{A24.7}$$

附录 25　用嘉当矩阵计算单纯李代数的全部正根

式 (7.57) 指出, 单纯李代数所有正根都可表为素根的非负整数线性组合, 这些组合系数之和称为该正根的级数. 素根是一级根. 可用递推的办法, 用嘉当矩阵 (7.64) 逐级找出各级正根. 设小于 m 级的正根已经找到, m 级的正根总是 $m-1$ 级正根和素根之和, 现要判断 $m-1$ 级正根 $\boldsymbol{\alpha}$ 和素根 $\boldsymbol{r}_j$ 之和是不是根. 这问题可以与找下面根链问题结合起来解决

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{\alpha}+n\boldsymbol{r}_j\ , \quad -q\leqslant n\leqslant p\ , &&\text{是根} \\ &\boldsymbol{\alpha}-(q+1)\boldsymbol{r}_j \ \ \text{和}\ \ \boldsymbol{\alpha}+(p+1)\boldsymbol{r}_j\ , &&\text{不是根} \end{aligned} \tag{A25.1}$$

因为小于 m 级的正根都已找到, q 是已知的. 为了计算 p, 设

$$\boldsymbol{\alpha}=\sum_{k=1}^{\ell} \boldsymbol{r}_k f_k \tag{A25.2}$$

则

$$p=q-\Gamma\left(\boldsymbol{\alpha}/\boldsymbol{r}_j\right)=q-\sum_{k=1}^{\ell} A_{jk} f_k \tag{A25.3}$$

若 $p=0$, 则 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{r}_j$ 不是根, 若 $p>0$, 则 $\boldsymbol{\alpha}+m\boldsymbol{r}_j$, $0\leqslant m\leqslant p$, 都是根. 用这办法可以找出单纯李代数的全部正根. 下面以 G_2 李代数为例说明这方法.

G_2 李代数的邓金图和嘉当矩阵如下：

1　　2

$$A=\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -3 & 2 \end{pmatrix} \tag{A25.4}$$

G_2 李代数有两个素根 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$, $\boldsymbol{r}_1$ 是长根. 先判断 $\boldsymbol{r}_1$ 加 $\boldsymbol{r}_2$ 是不是根. 把 $\boldsymbol{r}_1$ 看作 $\boldsymbol{\alpha}$, 则 $f_1=1$, $f_2=0$, $q=0$, 按式 (A25.3), $p=0-A_{21}f_1=3$, 故

$$\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{r}_2,\ \ \boldsymbol{r}_1+2\boldsymbol{r}_2\ \ \text{和}\ \ \boldsymbol{r}_1+3\boldsymbol{r}_2\ \ \text{都是根},\qquad \boldsymbol{r}_1+4\boldsymbol{r}_2\ \ \text{不是根}.$$

若把 $\boldsymbol{r}_2$ 看作 $\boldsymbol{\alpha}$, 则 $f_1=0$, $f_2=1$, $q=0$, 按式 (A25.3), $p=0-A_{12}f_2=1$, 故除重复得到 $\boldsymbol{r}_2+\boldsymbol{r}_1$ 是根外, 还知道 $\boldsymbol{r}_2+2\boldsymbol{r}_1$ 不是根.

事实上, 对二秩李代数, 二级根只有这一种可能性. 三级根有两种可能, 但已知 $\boldsymbol{r}_2+2\boldsymbol{r}_1$ 不是根, 故只有一个三级根 $\boldsymbol{r}_1+2\boldsymbol{r}_2$. 由它加 $\boldsymbol{r}_1$ 变成二级根的两倍, 显然不是根, 因而四级根也只有一个, $\boldsymbol{r}_1+3\boldsymbol{r}_2$.

现在讨论五级根. 取 $\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{r}_1+3\boldsymbol{r}_2$, 有 $f_1=1$, $f_2=3$. 已知 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{r}_2$ 不是根, 现要判断 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{r}_1$ 是不是根. 因为 $\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{r}_1$ 不是根, 所以 $q=0$

$$p=0-A_{11}f_1-A_{12}f_2=-2+3=1$$

得到五级根 $2\boldsymbol{r}_1+3\boldsymbol{r}_2$. 无论再加 $\boldsymbol{r}_1$ 还是 $\boldsymbol{r}_2$, 都得到已知根的倍数, 不能是根. 因此已找完了 G_2 李代数的全部正根, 包括素根共 6 个正根, 12 个根, G_2 代数的阶数为 $12+2=14$.

按照数学上的习惯, 取长根长度平方为 2, G_2 代数的素根取为

$$\boldsymbol{r}_1=\left(0,\ \sqrt{2}\right)\ ,\qquad \boldsymbol{r}_2=\left(\sqrt{1/6},\ -\sqrt{1/2}\right) \tag{A25.5}$$

以这两个素根为基础, 分别旋转 60° 的整数倍, 构成一大一小互相套叠的两个正六边形. 这就是 G_2 李代数的根图. 根图和伴随表示的平面权图是相同的, 见图 7.8 (2).

附录 26　SU(N) 群自身表示生成元的反对易关系

对 SU(N) 群自身表示生成元, 有时还用它们的反对易关系

$$\{T_A,\ T_B\}\equiv T_AT_B+T_BT_A=\sum_D\ d_{ABD}T_D+r_{AB}\mathbf{1} \tag{A26.1}$$

与对易关系不同之处在于, 厄米矩阵取反对易关系后得有迹厄米矩阵. 上式右面所有系数都是实数, 但必须补上单位矩阵的项. 等式两边取迹可确定实系数 r_{AB}

$$Nr_{AB}=\mathrm{Tr}\left\{T_AT_B+T_BT_A\right\}=\delta_{AB}$$

代回上式得

$$\{T_A,\ T_B\}\equiv T_AT_B+T_BT_A=\sum_D\ d_{ABD}T_D+\frac{1}{N}\delta_{AB}\mathbf{1} \tag{A26.2}$$

上式两边乘 T_D 后取迹, 可计算系数 d_{ABD}

$$d_{ABD}=2\mathrm{Tr}\left\{T_AT_BT_D+T_BT_AT_D\right\} \tag{A26.3}$$

实系数 d_{ABD} 关于三个指标完全对称. 直接计算可得自身表示生成元的反对易关系如下

$$\begin{aligned}
\left\{T_{ab}^{(1)},\ T_{cd}^{(1)}\right\}&=\frac{1}{2}\left(\delta_{bc}T_{ad}^{(1)}+\delta_{ad}T_{bc}^{(1)}+\delta_{ac}T_{bd}^{(1)}+\delta_{bd}T_{ac}^{(1)}\right),\\
\left\{T_{ab}^{(2)},\ T_{cd}^{(2)}\right\}&=\frac{1}{2}\left(-\delta_{bc}T_{ad}^{(1)}-\delta_{ad}T_{bc}^{(1)}+\delta_{ac}T_{bd}^{(1)}+\delta_{bd}T_{ac}^{(1)}\right),\\
\left\{T_{ab}^{(1)},\ T_{cd}^{(2)}\right\}&=\frac{1}{2}\left(\delta_{bc}T_{ad}^{(2)}-\delta_{ad}T_{bc}^{(2)}+\delta_{ac}T_{bd}^{(2)}-\delta_{bd}T_{ac}^{(2)}\right)
\end{aligned} \tag{A26.4}$$

$$\left\{T_a^{(3)},\ T_{ab}^{(r)}\right\} = -\left\{(a-1)/(2a)\right\}^{1/2} T_{ab}^{(r)} ,$$
$$\left\{T_c^{(3)},\ T_{ab}^{(r)}\right\} = \left\{2c(c-1)\right\}^{-1/2} T_{ab}^{(r)} ,$$
$$\left\{T_b^{(3)},\ T_{ab}^{(r)}\right\} = \frac{-b+2}{\left\{2b(b-1)\right\}^{1/2}} T_{ab}^{(r)} , \qquad a < c < b, \quad r = 1, 2 \qquad \text{(A26.5)}$$
$$\left\{T_b^{(3)},\ T_{ac}^{(r)}\right\} = \left\{\frac{2}{b(b-1)}\right\}^{1/2} T_{ac}^{(r)} ,$$
$$\left\{T_a^{(3)},\ T_{cb}^{(r)}\right\} = 0 ,$$

$$\left\{T_a^{(3)},\ T_a^{(3)}\right\} = 2\left\{T_a^{(3)}\right\}^2 = \frac{1}{a(a-1)} \sum_{d=1}^{a-1} T_{dd}^{(1)} + \frac{a-1}{a} T_{aa}^{(1)} ,$$
$$\left\{T_a^{(3)},\ T_b^{(3)}\right\} = \frac{1}{\left\{ab(a-1)(b-1)\right\}^{1/2}} \sum_{d=1}^{a-1} T_{dd}^{(1)} - \left\{\frac{a-1}{ab(b-1)}\right\}^{1/2} T_{aa}^{(1)} , \qquad a < b \qquad \text{(A26.6)}$$

式中, 右面 $T^{(1)}$ 的下标相等时, 就会出现单位矩阵项. SU(3) 群不为零的结构常数 f_{ABD} 和系数 d_{ABD} 列于表 A26.1.

表 A26.1 SU(3) 群不为零的结构常数 f_{ABD} 和系数 d_{ABD} 值

ABD	123	147	156	246	257	345	367	458	678
f_{ABD}	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{-1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{-1}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$

ABD	118	146	157	228	247	256	338	344
d_{ABD}	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{-1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{2}$

ABD	355	366	377	448	558	668	778	888
d_{ABD}	$\frac{1}{2}$	$\frac{-1}{2}$	$\frac{-1}{2}$	$\frac{-1}{2\sqrt{3}}$	$\frac{-1}{2\sqrt{3}}$	$\frac{-1}{2\sqrt{3}}$	$\frac{-1}{2\sqrt{3}}$	$\frac{-1}{\sqrt{3}}$

附录 27 实赝正交矩阵的行列式

把实赝正交矩阵看成 2ℓ 维实线性空间的变换矩阵

$$x_a \xrightarrow{R} x_a' = \sum_b R_{ab} x_b , \qquad R \in \mathrm{Sp}(2\ell, R) \qquad \text{(A27.1)}$$

我们知道, 实正交变换保持实矢量点乘 (内积) 不变, 现在定义实矢量 x 和 y 间的一种新内积, 称为赝内积

$$\{x,\ y\}_J \equiv \sum_{ab} x_a J_{ab} y_b = \sum_{j=1}^{\ell} \left(x_j y_{\bar{j}} - x_{\bar{j}} y_j\right) \qquad \text{(A27.2)}$$

显然, 赝内积在实赝正交变换中保持不变

$$\{x,\ y\}_J = \{Rx,\ Ry\}_J \tag{A27.3}$$

而且同一矢量的赝内积为零.

对于 2ℓ 阶完全反对称张量 $\epsilon_{a_1\cdots a_{2\ell}}$, 由式 (7.105) 不难证明

$$\sum_{a_1\cdots a_{2\ell}} \epsilon_{a_1\cdots a_{2\ell}} J_{a_1a_2}\cdots J_{a_{2\ell-1}a_{2\ell}} = 2^\ell \ell! \tag{A27.4}$$

实际上, 式 (A27.4) 左面如下项等于 1, 这项指标 a_{2j-1} 取 j, a_{2j} 取 $\overline{j}$. 当指标置换时产生的非零项都等于 1, 而这样的项数如下: J 之间的交换有 $\ell!$ 项, J 下标的交换有 2^ℓ 项. 把 $(2\ell)\times(2\ell)$ 矩阵 X 的行指标写成协变指标, 列指标写成逆变指标, 则按式 (1.12), 实 X 矩阵的行列式可表为

$$\begin{aligned} \det X &= \sum_{b_1\cdots b_{2\ell}} \epsilon_{b_1\cdots b_{2\ell}} X_1^{b_1}\cdots X_{2\ell}^{b_{2\ell}}, \\ \epsilon_{a_1\cdots a_{2\ell}} \det X &= \sum_{b_1\cdots b_{2\ell}} \epsilon_{b_1\cdots b_{2\ell}} X_{a_1}^{b_1}\cdots X_{a_{2\ell}}^{b_{2\ell}} \end{aligned} \tag{A27.5}$$

再利用式 (A27.4), 得

$$\begin{aligned} \det X &= \left(2^\ell\ell!\right)^{-1} \sum_{a_1\cdots a_{2\ell}} (\det X)\, \epsilon_{a_1\cdots a_{2\ell}} J_{a_1a_2}\cdots J_{a_{2\ell-1}a_{2\ell}} \\ &= \left(2^\ell\ell!\right)^{-1} \sum_{a_1\cdots a_{2\ell}} J_{a_1a_2}\cdots J_{a_{2\ell-1}a_{2\ell}} \sum_{b_1\cdots b_{2\ell}} \epsilon_{b_1\cdots b_{2\ell}} X_{a_1}^{b_1}\cdots X_{a_{2\ell}}^{b_{2\ell}} \\ &= \left(2^\ell\ell!\right)^{-1} \sum_{b_1\cdots b_{2\ell}} \epsilon_{b_1\cdots b_{2\ell}} \left\{X^{b_1},\ X^{b_2}\right\}_J \cdots \left\{X^{b_{2\ell-1}},\ X^{b_{2\ell}}\right\}_J \end{aligned} \tag{A27.6}$$

末式用了赝内积的定义 (A27.2). 因为 $\det(RX)$ 就是对 X 矩阵的各列矩阵同时作实赝正交变换 R 后再取行列式, 而式 (A27.6) 右面对 R 变换保持不变, 所以

$$\det(RX) = \det X\ , \qquad \det R = 1 \tag{A27.7}$$

实赝正交矩阵 R 的行列式为 1. 把 2ℓ 维实线性空间改为复空间, 并把式 (A27.1) 中的 R 换成 $u\in\mathrm{USp}(2\ell)$, 同样可证 $\det u = 1$.

附录 28 辛群独立实参数的数目

根据辛群元素的定义 (7.107) 和 (7.109), 直接计算辛群元素的独立实参数数目. 2ℓ 维实矩阵有 $(2\ell)^2$ 个实参数. 定义 (7.107) 指出 $R\in\mathrm{Sp}(2\ell, R)$ 的 a 和 b 列矩阵的赝内积等于 J_{ab}

$$\{R_{\cdot a},\ R_{\cdot b}\}_J = \sum_{j=1}^{\ell} \left(R_{ja}R_{\overline{j}b} - R_{\overline{j}a}R_{jb}\right) = J_{ab} \tag{A28.1}$$

当 $a = b$ 时上式是恒等式, 当 $a \neq b$ 时上式给出 $\ell(2\ell - 1)$ 个独立的实条件, 因而 $\mathrm{Sp}(2\ell, R)$ 群元素的独立实参数数目是 $(2\ell)^2 - \ell(2\ell - 1) = \ell(2\ell + 1)$.

2ℓ 维复矩阵有 $2(2\ell)^2$ 个实参数. 由 $u^{-1} = -Ju^T J$ 得 $u^* = -JuJ$

$$u_{jk}^* = u_{\overline{jk}}, \qquad u_{j\overline{k}}^* = -u_{\overline{j}k} \tag{A28.2}$$

各给出 $2\ell^2$ 个独立实条件. 由幺正条件 $\sum_d u_{da}^* u_{db} = \delta_{ab}$ 得如下约束. 情况 $a = b = j$ 和情况 $a = b = \overline{j}$ 相同, 给出 ℓ 个独立实条件

$$\begin{aligned}
a = b = j, \qquad & \sum_{k=1}^{\ell} \left(u_{\overline{kj}} u_{kj} - u_{k\overline{j}} u_{\overline{k}j} \right) = \sum_{k=1}^{\ell} \left(|u_{kj}|^2 + |u_{\overline{k}j}|^2 \right) = 1, \\
a = b = \overline{j}, \qquad & \sum_{k=1}^{\ell} \left(-u_{\overline{k}j} u_{k\overline{j}} + u_{kj} u_{\overline{kj}} \right) = 1
\end{aligned}$$

当 $j \neq k$ 时, 情况 $a = j, b = k$ 和情况 $a = \overline{k}, b = \overline{j}$ 相同, 由于式 (A28.2), 交换 a 和 b 情况也相同, 共给出 $\ell(\ell - 1)/2$ 个独立复条件

$$\begin{aligned}
a = j, \ \ b = k \neq j, \qquad & \sum_{\tau=1}^{\ell} \left(u_{\overline{\tau j}} u_{\tau k} - u_{\tau \overline{j}} u_{\overline{\tau} k} \right) = 0, \\
a = \overline{k}, \ \ b = \overline{j} \neq \overline{k}, \qquad & \sum_{\tau=1}^{\ell} \left(-u_{\overline{\tau} k} u_{\tau \overline{j}} + u_{\tau k} u_{\overline{\tau j}} \right) = 0
\end{aligned}$$

当 $j \neq k$ 时, 情况 $a = j, b = \overline{k}$ 和情况 $a = k, b = \overline{j}$ 相同, 由于式 (A28.2), 交换 a 和 b 情况也相同, 共给出 $\ell(\ell - 1)/2$ 个独立复条件

$$\begin{aligned}
a = j, \ \ b = \overline{k} \neq \overline{j}, \qquad & \sum_{\tau=1}^{\ell} \left(u_{\overline{\tau j}} u_{\tau \overline{k}} - u_{\tau \overline{j}} u_{\overline{\tau k}} \right) = 0, \\
a = k, \ \ b = \overline{j} \neq \overline{k}, \qquad & \sum_{\tau=1}^{\ell} \left(u_{\overline{\tau k}} u_{\tau \overline{j}} - u_{\tau \overline{k}} u_{\overline{\tau j}} \right) = 0
\end{aligned}$$

一个复条件等价于两个实条件, 总共有 $(2\ell)^2 + \ell + 2\ell(\ell - 1) = 6\ell^2 - \ell$ 个实条件, 因而 $\mathrm{USp}(2\ell)$ 群元素包含的独立实参数数目为 $8\ell^2 - \left(6\ell^2 - \ell\right) = \ell(2\ell + 1)$.

附录 29 单纯李代数的重要性质

本附录列举各单纯李代数的邓金图, 嘉当矩阵及其逆矩阵, 素根, 正根, 基本主权和其他主要参数, 诸如素根长度 d_μ, 最大根 ω, 若干重要表示的维数 $d(\boldsymbol{M})$ 和卡西米尔不变量 $C_2(\boldsymbol{M})$ 等. 伴随表示的最高权 $\boldsymbol{M}_{\text{adj}}$ 就是最大根 $\boldsymbol{\omega}$, 伴随表示中的卡

西米尔不变量 $C_2(\boldsymbol{M}_{\rm adj})$ 改符号后就是基林型的常数值, $g_{AB}=-\delta_{AB}C_2(\boldsymbol{M}_{\rm adj})$. 按数学习惯取长根的长度平方为 2, 即 $d_\mu=1$. 这规定与 SU(N) 群的物理习惯不同, 即根的长度平方和卡西米尔不变量都增大了两倍.

一、A_ℓ 李代数和 SU(ℓ+1) 群

A_ℓ 李代数的邓金图, 嘉当矩阵及其逆矩阵和主要参数如下:

$$\circ\!-\!\!-\!\circ\!-\!\!-\!\circ\cdots\circ\!-\!\!-\!\circ\!-\!\!-\!\circ$$
$$1 \quad 2 \quad 3 \quad \ell-2 \quad \ell-1 \quad \ell$$

$$A=\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0\\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0\\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0\\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdots & \cdot & \cdot\\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 & -1\\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$A^{-1}=\frac{1}{\ell+1}\begin{pmatrix} 1\cdot\ell & 1\cdot(\ell-1) & 1\cdot(\ell-2) & \cdots & 1\cdot 2 & 1\cdot 1\\ 1\cdot(\ell-1) & 2\cdot(\ell-1) & 2\cdot(\ell-2) & \cdots & 2\cdot 2 & 2\cdot 1\\ 1\cdot(\ell-2) & 2\cdot(\ell-2) & 3\cdot(\ell-2) & \cdots & 3\cdot 2 & 3\cdot 1\\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdots & \cdot & \cdot\\ 1\cdot 2 & 2\cdot 2 & 3\cdot 2 & \cdots & (\ell-1)\cdot 2 & (\ell-1)\cdot 1\\ 1\cdot 1 & 2\cdot 1 & 3\cdot 1 & \cdots & (\ell-1)\cdot 1 & \ell\cdot 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} & d_\mu=1\ , && 1\leqslant\mu\leqslant\ell,\\ & \boldsymbol{M}_0=\boldsymbol{w}_1\ , && \boldsymbol{M}_{\rm adj}=\boldsymbol{\omega}=\boldsymbol{w}_1+\boldsymbol{w}_\ell,\\ & d(\boldsymbol{M}_0)=\ell+1\ , && d(\boldsymbol{M}_{\rm adj})=\ell(\ell+2),\\ & C_2(\boldsymbol{M}_0)=\frac{\ell^2+2\ell}{\ell+1}\ , && C_2(\boldsymbol{M}_{\rm adj})=2(\ell+1) \end{aligned} \tag{A29.1}$$

采用式 (7.85) 引入的 $\ell+1$ 个线性相关的矢量 $\boldsymbol{V}_a$ 作基

$$\boldsymbol{V}_a\cdot\boldsymbol{V}_b=\frac{\delta_{ab}}{2}-\frac{1}{2(\ell+1)},\qquad \boldsymbol{V}_{\ell+1}=-\sum_{a=1}^{\ell}\boldsymbol{V}_a \tag{A29.2}$$

这 $\ell+1$ 个矢量对称地分布在 ℓ 维空间中, $\boldsymbol{V}_{\ell+1}$ 沿第一个轴的负向. 素根 $\boldsymbol{r}_j$ 和基本主权 $\boldsymbol{w}_j$ 可用这组基表出

$$\boldsymbol{r}_\mu=\sqrt{2}\left(\boldsymbol{V}_\mu-\boldsymbol{V}_{\mu+1}\right)\ ,\qquad \boldsymbol{w}_\mu=\sqrt{2}\sum_{\nu=1}^{\mu}\boldsymbol{V}_\nu,\qquad 1\leqslant\mu\leqslant\ell \tag{A29.3}$$

A_ℓ 李代数的阶是 $\ell(\ell+2)$, 它共有 $\ell(\ell+1)$ 个根, 表为 $\sqrt{2}(\boldsymbol{V}_a-\boldsymbol{V}_b)$ 的形式. 最高权为 $\boldsymbol{M}$ 的表示维数为

$$d(\boldsymbol{M})=\prod_{a<b}^{\ell+1}\left\{1+\sum_{\mu=a}^{b-1}\frac{M_\mu}{b-a}\right\} \tag{A29.4}$$

其中, M_μ 是最高权 $\boldsymbol{M}$ 在基本主权表象 $\boldsymbol{w}_\mu$ 中的分量. 下同.

二、B_ℓ 李代数和 $SO(2\ell+1)$ 群

作为李代数, $B_1=A_1$, $B_2=C_2$, 本节讨论 $\ell\geqslant 3$ 的李代数 B_ℓ, 它的邓金图, 嘉当矩阵及其逆矩阵, 和主要参数如下:

○——○——○- - - - -○——○══●
1　　2　　3　　$\ell-2$　$\ell-1$　　ℓ

$$A=\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0\\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0\\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 & 0\\ . & . & . & \cdots & . & .\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 & -1\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 2 \end{pmatrix}$$

$$A^{-1}=\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1/2\\ 1 & 2 & 2 & \cdots & 2 & 1\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & 3 & 3/2\\ . & . & . & \cdots & . & .\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & \ell-1 & (\ell-1)/2\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & \ell-1 & \ell/2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} &d_\mu=1\,, && 1\leqslant\mu\leqslant\ell-1\,, && d_\ell=1/2,\\ &\boldsymbol{M}_0=\boldsymbol{w}_1\,, && \boldsymbol{M}_{\rm adj}=\boldsymbol{\omega}=\boldsymbol{w}_2\,, && \boldsymbol{M}_S=\boldsymbol{w}_\ell,\\ &d(\boldsymbol{M}_0)=2\ell+1\,, && d(\boldsymbol{M}_{\rm adj})=\ell(2\ell+1)\,, && d(\boldsymbol{M}_S)=2^\ell,\\ &C_2(\boldsymbol{M}_0)=2\ell\,, && C_2(\boldsymbol{M}_{\rm adj})=2(2\ell-1)\,, && C_2(\boldsymbol{M}_S)=\ell(2\ell+1)/4 \end{aligned} \tag{A29.5}$$

其中, $\boldsymbol{M}_S$ 是基本旋量表示. B_2 李代数的最大根, 即伴随表示最高权 $\boldsymbol{\omega}$ 是 $2\boldsymbol{w}_2$, 而不是 $\boldsymbol{w}_2$, 因而 $B_2=C_2$ 归入 C_ℓ 系列.

在 ℓ 维空间直角坐标系的正交基 $\boldsymbol{e}_\mu$ 中, 素根和基本主权表为

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{r}_\mu=\boldsymbol{e}_\mu-\boldsymbol{e}_{\mu+1}\,, && 1\leqslant\mu\leqslant(\ell-1)\,, && \boldsymbol{r}_\ell=\boldsymbol{e}_\ell,\\ &\boldsymbol{w}_\mu=\sum_{\nu=1}^{\mu}\boldsymbol{e}_\nu, && 1\leqslant\mu<\ell, && \boldsymbol{w}_\ell=\frac{1}{2}\sum_{\nu=1}^{\ell}\boldsymbol{e}_\nu\,. \end{aligned} \tag{A29.6}$$

B_ℓ 李代数的阶为 $\ell(2\ell+1)$, 它共有 $2\ell^2$ 个根, 可表为 $\pm \boldsymbol{e}_\mu$, $\pm(\boldsymbol{e}_\mu+\boldsymbol{e}_\nu)$ 和 $(\boldsymbol{e}_\mu-\boldsymbol{e}_\nu)$ 的形式. 最高权表示 $\boldsymbol{M}$ 的维数是

$$d(\boldsymbol{M})=\prod_{\lambda=1}^{\ell}\left\{1+\frac{M_\ell+2\sum\limits_{\rho=\lambda}^{\ell-1}M_\rho}{1+2(\ell-\lambda)}\right\} \times\prod_{\mu<\nu}^{\ell}\left\{\left(1+\frac{M_\ell+\sum\limits_{\rho=\mu}^{\nu-1}M_\rho+\sum\limits_{\rho=\nu}^{\ell-1}2M_\rho}{1+2\ell-\mu-\nu}\right)\left(1+\frac{\sum\limits_{\rho=\mu}^{\nu-1}M_\rho}{\nu-\mu}\right)\right\} \tag{A29.7}$$

三、C_ℓ 李代数和 USp(2ℓ) 群

作为李代数, $C_1=A_1$, 本节讨论 $\ell\geqslant 2$ 的 C_ℓ 李代数, 它的邓金图、嘉当矩阵及其逆矩阵和主要参数如下:

●—●—●- - - -●—●═○
1　2　3　$\ell-2$　$\ell-1$　ℓ

$$A=\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0\\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0\\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 & 0\\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdots & \cdot & \cdot\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 & -2\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$A^{-1}=\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1\\ 1 & 2 & 2 & \cdots & 2 & 2\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & 3 & 3\\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdots & \cdot & \cdot\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & \ell-1 & \ell-1\\ 1/2 & 1 & 3/2 & \cdots & (\ell-1)/2 & \ell/2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} &d_\mu=1/2\,, \quad 1\leqslant\mu\leqslant(\ell-1)\,, && d_\ell=1,\\ &\boldsymbol{M}_0=\boldsymbol{w}_1\,, && \boldsymbol{M}_{\rm adj}=\boldsymbol{\omega}=2\boldsymbol{w}_1,\\ &d(\boldsymbol{M}_0)=2\ell\,, && d(\boldsymbol{M}_{\rm adj})=\ell(2\ell+1),\\ &C_2(\boldsymbol{M}_0)=\ell+1/2\,, && C_2(\boldsymbol{M}_{\rm adj})=2(\ell+1) \end{aligned} \tag{A29.8}$$

在 ℓ 维空间直角坐标系的正交基 $\boldsymbol{e}_\mu$ 中, C_ℓ 李代数的素根和基本主权可表为

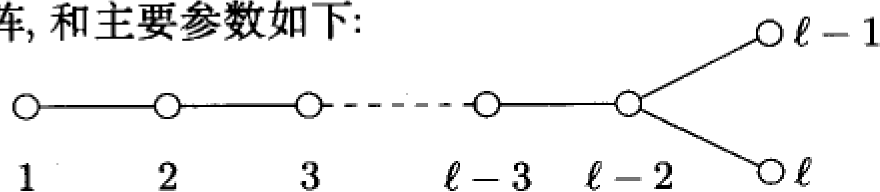
$$\begin{aligned}&\boldsymbol{r}_\mu=\sqrt{1/2}\{\boldsymbol{e}_\mu-\boldsymbol{e}_{\mu+1}\}\ ,\qquad 1\leqslant\mu\leqslant(\ell-1)\ ,\qquad \boldsymbol{r}_\ell=\sqrt{2}\boldsymbol{e}_\ell,\\&\boldsymbol{w}_\mu=\sqrt{1/2}\sum_{\nu=1}^{\mu}\boldsymbol{e}_\nu,\qquad 1\leqslant\mu\leqslant\ell\end{aligned}\tag{A29.9}$$

C_ℓ 李代数的阶为 $\ell(2\ell+1)$, 共有 $2\ell^2$ 个根, 表为 $\sqrt{1/2}\{\boldsymbol{e}_\mu-\boldsymbol{e}_\nu\}$, $\pm\sqrt{1/2}\{\boldsymbol{e}_\mu+\boldsymbol{e}_\nu\}$ 和 $\pm\sqrt{2}\boldsymbol{e}_\mu$. 最高权表示 $\boldsymbol{M}$ 的维数是

$$d(\boldsymbol{M})=\prod_{\lambda=1}^{\ell}\left\{1+\frac{\sum_{\rho=\lambda}^{\ell}M_\rho}{\ell+1-\lambda}\right\}\prod_{\mu<\nu}^{\ell}\left\{\left(1+\frac{\sum_{\rho=\mu}^{\nu-1}M_\rho+\sum_{\rho=\nu}^{\ell}2M_\rho}{2\ell+2-\mu-\nu}\right)\left(1+\frac{\sum_{\rho=\mu}^{\nu-1}M_\rho}{\nu-\mu}\right)\right\}\tag{A29.10}$$

四、D_ℓ 李代数和 SO(2ℓ) 群

作为李代数, $D_2=A_1\oplus A_1$, $D_3=A_3$, 本节讨论 $\ell\geqslant4$ 的李代数 D_ℓ, 它的邓金图, 嘉当矩阵及其逆矩阵, 和主要参数如下:



$$A=\begin{pmatrix}2&-1&0&0&\cdots&0&0&0\\-1&2&-1&0&\cdots&0&0&0\\0&-1&2&-1&\cdots&0&0&0\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdots&\cdot&\cdot&\cdot\\0&0&0&0&\cdots&2&-1&-1\\0&0&0&0&\cdots&-1&2&0\\0&0&0&0&\cdots&-1&0&2\end{pmatrix}$$

$$A^{-1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}2&2&2&\cdots&2&1&1\\2&4&4&\cdots&4&2&2\\2&4&6&\cdots&6&3&3\\ \cdot&\cdot&\cdot&\cdots&\cdot&\cdot&\cdot\\2&4&6&\cdots&2(\ell-2)&\ell-2&\ell-2\\1&2&3&\cdots&\ell-2&\ell/2&(\ell-2)/2\\1&2&3&\cdots&\ell-2&(\ell-2)/2&\ell/2\end{pmatrix}$$

$$
\begin{array}{lll}
d_\mu = 1 \ , & 1 \leqslant \mu \leqslant \ell \ , & \boldsymbol{M}_0 = \boldsymbol{w}_1, \\
\boldsymbol{M}_{\rm adj} = \boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{w}_2 \ , & \boldsymbol{M}_{S1} = \boldsymbol{w}_{\ell-1} \ , & \boldsymbol{M}_{S2} = \boldsymbol{w}_\ell, \\
d(\boldsymbol{M}_0) = 2\ell \ , & d(\boldsymbol{M}_{\rm adj}) = \ell(2\ell-1) \ , & d(\boldsymbol{M}_{S1}) = d(\boldsymbol{M}_{S2}) = 2^{\ell-1}, \\
C_2(\boldsymbol{M}_0) = 2\ell - 1 \ , & C_2(\boldsymbol{M}_{\rm adj}) = 4(\ell-1) \ , & C_2(\boldsymbol{M}_{S1}) = C_2(\boldsymbol{M}_{S2}) = \ell(2\ell-1)/4
\end{array}
\tag{A29.11}
$$

其中, $\boldsymbol{M}_{S1}$ 和 $\boldsymbol{M}_{S2}$ 是两个不等价的基本旋量表示.

在 ℓ 维空间直角坐标系的正交基 $\boldsymbol{e}_\mu$ 中, 素根和基本主权表为

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{r}_\mu = \boldsymbol{e}_\mu - \boldsymbol{e}_{\mu+1} \ , \qquad 1 \leqslant \mu \leqslant (\ell-1) \ , \qquad \boldsymbol{r}_\ell = \boldsymbol{e}_{\ell-1} + \boldsymbol{e}_\ell, \\
&\boldsymbol{w}_\nu = \sum_{\rho=1}^{\nu} \boldsymbol{e}_\rho, \qquad 1 \leqslant \nu \leqslant \ell - 2, \\
&\boldsymbol{w}_{\ell-1} = \frac{1}{2}\sum_{\rho=1}^{\ell-1} \boldsymbol{e}_\rho - \frac{1}{2}\boldsymbol{e}_\ell, \qquad \boldsymbol{w}_\ell = \frac{1}{2}\sum_{\rho=1}^{\ell} \boldsymbol{e}_\rho
\end{aligned}
\tag{A29.12}
$$

D_ℓ 李代数的阶为 $\ell(2\ell-1)$, 它共有 $2\ell(\ell-1)$ 个根, 表为 $\pm(\boldsymbol{e}_\mu + \boldsymbol{e}_\nu)$ 和 $(\boldsymbol{e}_\mu - \boldsymbol{e}_\nu)$ 的形式. 最高权表示 $\boldsymbol{M}$ 的维数是

$$
d(\boldsymbol{M}) = \prod_{\mu<\nu}^{\ell} \left\{ \left(1 + \frac{\displaystyle\sum_{\rho=\mu}^{\nu-1} M_\rho + \sum_{\rho=\nu}^{\ell} 2M_\rho - M_{\ell-1} - M_\ell}{2\ell - \mu - \nu} \right) \left(1 + \frac{\displaystyle\sum_{\rho=\mu}^{\nu-1} M_\rho}{\nu - \mu} \right) \right\}
\tag{A29.13}
$$

五、G_2 李代数

G_2 李代数的邓金图, 嘉当矩阵及其逆矩阵和主要参数如下:

$$
\text{○}\!\equiv\!\!\equiv\!\text{●} \ (1,\ 2) \qquad A = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -3 & 2 \end{pmatrix}, \qquad A^{-1} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}
$$

$$
\begin{array}{llll}
d_1 = 1 \ , & d_2 = 1/3 \ , & \boldsymbol{M}_0 = \boldsymbol{w}_2 \ , & \boldsymbol{M}_{\rm adj} = \boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{w}_1, \\
d(\boldsymbol{M}_0) = 7 \ , & d(\boldsymbol{M}_{\rm adj}) = 14 \ , & C_2(\boldsymbol{M}_0) = 4 \ , & C_2(\boldsymbol{M}_{\rm adj}) = 8
\end{array}
\tag{A29.14}
$$

在二维空间直角坐标系的正交基 $\boldsymbol{e}_\mu$ 中, 素根和基本主权表为

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{r}_1 = \sqrt{2}\boldsymbol{e}_2 \ , &&\boldsymbol{r}_2 = \sqrt{1/6}\boldsymbol{e}_1 - \sqrt{1/2}\boldsymbol{e}_2, \\
&\boldsymbol{w}_1 = \sqrt{3/2}\boldsymbol{e}_1 + \sqrt{1/2}\boldsymbol{e}_2 \ , &&\boldsymbol{w}_2 = \sqrt{2/3}\boldsymbol{e}_1
\end{aligned}
\tag{A29.15}
$$

G_2 李代数共有 12 个根, 其余 4 个正根为

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2 = \sqrt{1/6}\boldsymbol{e}_1 + \sqrt{1/2}\boldsymbol{e}_2 \ , &&\boldsymbol{r}_1 + 2\boldsymbol{r}_2 = \sqrt{2/3}\boldsymbol{e}_1, \\
&\boldsymbol{r}_1 + 3\boldsymbol{r}_2 = \sqrt{3/2}\boldsymbol{e}_1 - \sqrt{1/2}\boldsymbol{e}_2 \ , &&2\boldsymbol{r}_1 + 3\boldsymbol{r}_2 = \sqrt{3/2}\boldsymbol{e}_1 + \sqrt{1/2}\boldsymbol{e}_2
\end{aligned}
\tag{A29.16}
$$

G_2 李代数的阶为 14. 最高权表示 $\boldsymbol{M}$ 的维数是

$$\begin{aligned} d(\boldsymbol{M}) &= (1+M_1)(1+M_2)(4+3M_1+M_2)(5+3M_1+2M_2) \\ &\quad \times(2+M_1+M_2)(3+2M_1+M_2)/120 . \end{aligned} \tag{A29.17}$$

六、F_4 李代数

F_4 李代数的邓金图, 嘉当矩阵及其逆矩阵和主要参数如下:

$$\circ\!-\!\!-\!\!-\!\circ\!=\!\!=\!\!=\!\bullet\!-\!\!-\!\!-\!\bullet \qquad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4$$

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -2 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}, \qquad A^{-1} = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 2 & 1 \\ 3 & 6 & 4 & 2 \\ 4 & 8 & 6 & 3 \\ 2 & 4 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} &d_1 = d_2 = 1 , && d_3 = d_4 = 1/2, \\ &\boldsymbol{M}_0 = \boldsymbol{w}_4 , && \boldsymbol{M}_{\text{adj}} = \boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{w}_1, \\ &d(\boldsymbol{M}_0) = 26 , && d(\boldsymbol{M}_{\text{adj}}) = 52, \\ &C_2(\boldsymbol{M}_0) = 12 , && C_2(\boldsymbol{M}_{\text{adj}}) = 18 \end{aligned} \tag{A29.18}$$

在四维空间直角坐标系的正交基 $\boldsymbol{e}_\mu$ 中, 素根和基本主权表为

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{e}_2 - \boldsymbol{e}_3 , && \boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{e}_3 - \boldsymbol{e}_4, \\ &\boldsymbol{r}_3 = \boldsymbol{e}_4 , && \boldsymbol{r}_4 = (\boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{e}_2 - \boldsymbol{e}_3 - \boldsymbol{e}_4)/2, \\ &\boldsymbol{w}_1 = \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 , && \boldsymbol{w}_2 = 2\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3, \\ &\boldsymbol{w}_3 = (3\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3 + \boldsymbol{e}_4)/2 , && \boldsymbol{w}_4 = \boldsymbol{e}_1 \end{aligned} \tag{A29.19}$$

F_4 代数的阶为 52, 共有 48 个根. 它包含 B_4 李代数的全部 32 个根 $\pm\boldsymbol{e}_\mu$, $\pm(\boldsymbol{e}_\mu+\boldsymbol{e}_\nu)$, $(\boldsymbol{e}_\mu-\boldsymbol{e}_\nu)$, 还有 16 个如下形式的根

$$a\boldsymbol{e}_1 + b\boldsymbol{e}_2 + c\boldsymbol{e}_3 + d\boldsymbol{e}_4 \tag{A29.20}$$

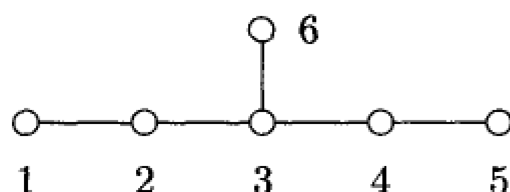
其中, a, b, c 和 d 独立地取 ±1. B_4 是 F_4 的子李代数, 但不是理想. 最高权表示 $\boldsymbol{M}$ 的维数是

$$\begin{aligned} d(\boldsymbol{M}) &= \{1+(2M_1+4M_2+3M_3+2M_4)/11\}\{1+(2M_1+2M_2+M_3)/5\} \\ &\quad \times\{1+(2M_2+M_3)/3\}\{1+M_3\}\{1+(2M_1+3M_2+2M_3+M_4)/8\} \\ &\quad \times\{1+(M_2+M_3+M_4)/3\}\{1+(M_1+3M_2+2M_3+M_4)/7\} \\ &\quad \times\{1+(M_1+M_2+M_3+M_4)/4\}\{1+(M_1+2M_2+2M_3+M_4)/6\} \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&\times\{1+(M_1+2M_2+M_3+M_4)/5\}\{1+(M_1+2M_2+M_3)/4\}\{1+M_1\}\\
&\times\{1+(M_1+M_2+M_3)/3\}\{1+(M_1+M_2)/2\}\{1+(M_2+M_3)/2\}\\
&\times\{1+M_2\}\{1+(2M_1+4M_2+3M_3+M_4)/10\}\\
&\times\{1+(2M_2+2M_3+M_4)/5\}\{1+(2M_1+2M_2+2M_3+M_4)/7\}\\
&\times\{1+(2M_1+4M_2+2M_3+M_4)/9\}\{1+(M_3+M_4)/2\}\{1+M_4\}\\
&\times\{1+(2M_2+M_3+M_4)/4\}\{1+(2M_1+2M_2+M_3+M_4)/6\}\ .
\end{aligned}
\tag{A29.21}
$$

七、E_6 李代数

E_6 李代数的邓金图, 嘉当矩阵及其逆矩阵和主要参数如下:



$$
A=\begin{pmatrix}
2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0\\
-1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0\\
0 & -1 & 2 & -1 & 0 & -1\\
0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0\\
0 & 0 & 0 & -1 & 2 & 0\\
0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 2
\end{pmatrix},\qquad
A^{-1}=\frac{1}{3}\begin{pmatrix}
4 & 5 & 6 & 4 & 2 & 3\\
5 & 10 & 12 & 8 & 4 & 6\\
6 & 12 & 18 & 12 & 6 & 9\\
4 & 8 & 12 & 10 & 5 & 6\\
2 & 4 & 6 & 5 & 4 & 3\\
3 & 6 & 9 & 6 & 3 & 6
\end{pmatrix}
$$

$$
\begin{aligned}
&d_\mu=1, && 1\leqslant\mu\leqslant 6, && \boldsymbol{M}_0=\boldsymbol{w}_1, && \boldsymbol{M}_{\rm adj}=\boldsymbol{\omega}=\boldsymbol{w}_6,\\
&d(\boldsymbol{M}_0)=27, && d(\boldsymbol{M}_{\rm adj})=78, && C_2(\boldsymbol{M}_0)=52/3, && C_2(\boldsymbol{M}_{\rm adj})=24
\end{aligned}
\tag{A29.22}
$$

引入六维空间六个线性相关矢量 $\boldsymbol{U}_a$, $\sum\boldsymbol{U}_a=0$. 它们的第六分量都为零, 前五个分量采用 A_5 李代数中定义的矢量 $\boldsymbol{V}_a$, $1\leqslant a\leqslant 6$. 再定义 $\boldsymbol{e}_6$, 它只有第六个分量为 1, 前五个分量都为 0. 这样, 线性无关的基共有六个, 用这组基表达 E_6 李代数的素根和基本主权较为方便

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{r}_1=\sqrt{2}\boldsymbol{e}_6\ , && \boldsymbol{r}_2=\sqrt{2}(\boldsymbol{U}_3+\boldsymbol{U}_4+\boldsymbol{U}_5)-\boldsymbol{e}_6/\sqrt{2},\\
&\boldsymbol{r}_3=\sqrt{2}(\boldsymbol{U}_2-\boldsymbol{U}_3)\ , && \boldsymbol{r}_4=\sqrt{2}(\boldsymbol{U}_3-\boldsymbol{U}_4),\\
&\boldsymbol{r}_5=\sqrt{2}(\boldsymbol{U}_4-\boldsymbol{U}_5)\ , && \boldsymbol{r}_6=\sqrt{2}(\boldsymbol{U}_1-\boldsymbol{U}_2),\\
&\boldsymbol{w}_1=-\sqrt{2}\boldsymbol{U}_6+\boldsymbol{e}_6/\sqrt{2}\ , && \boldsymbol{w}_2=-2\sqrt{2}\boldsymbol{U}_6\ ,\\
&\boldsymbol{w}_3=\sqrt{2}(\boldsymbol{U}_1+\boldsymbol{U}_2-2\boldsymbol{U}_6)\ , && \boldsymbol{w}_4=\sqrt{2}(\boldsymbol{U}_1+\boldsymbol{U}_2+\boldsymbol{U}_3-\boldsymbol{U}_6),\\
&\boldsymbol{w}_5=-\sqrt{2}(\boldsymbol{U}_5+\boldsymbol{U}_6)\ , && \boldsymbol{w}_6=\sqrt{2}(\boldsymbol{U}_1-\boldsymbol{U}_6)
\end{aligned}
\tag{A29.23}
$$

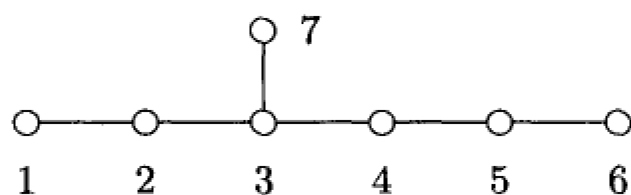
E_6 李代数的阶为 78, 共有 72 个根. 它包含 A_5 李代数的全部 30 个根, 即 $\sqrt{2}(\boldsymbol{U}_a-\boldsymbol{U}_b)$, 还有 $\pm\sqrt{2}\boldsymbol{e}_6$, 和如下形式的 40 个根

$$\sqrt{2}\,(\boldsymbol{U}_a+\boldsymbol{U}_b+\boldsymbol{U}_c)\pm\boldsymbol{e}_6/\sqrt{2} \tag{A29.24}$$

其中, a, b 和 c 互不相等地取 $1\sim6$ 中任意三个数值. A_5 是 E_6 的子李代数, 但不是理想.

八、E_7 李代数

E_7 李代数的邓金图, 嘉当矩阵及其逆矩阵和主要参数如下:



$$A=\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & -1\\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$A^{-1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 4 & 6 & 8 & 6 & 4 & 2 & 4\\ 6 & 12 & 16 & 12 & 8 & 4 & 8\\ 8 & 16 & 24 & 18 & 12 & 6 & 12\\ 6 & 12 & 18 & 15 & 10 & 5 & 9\\ 4 & 8 & 12 & 10 & 8 & 4 & 6\\ 2 & 4 & 6 & 5 & 4 & 3 & 3\\ 4 & 8 & 12 & 9 & 6 & 3 & 7 \end{pmatrix}$$

$$\begin{array}{llll} d_\mu=1\,, & 1\leqslant\mu\leqslant7\,, & \boldsymbol{M}_0=\boldsymbol{w}_6\,, & \boldsymbol{M}_{\rm adj}=\boldsymbol{\omega}=\boldsymbol{w}_1\,,\\ d(\boldsymbol{M}_0)=56\,, & d(\boldsymbol{M}_{\rm adj})=133\,, & C_2(\boldsymbol{M}_0)=57/2\,, & C_2(\boldsymbol{M}_{\rm adj})=36 \end{array} \tag{A29.25}$$

采用 A_7 李代数中定义的矢量 $\boldsymbol{V}_a$, $1 \leqslant a \leqslant 8$, $\boldsymbol{V}_8 = -\sum_{b=1}^{7} \boldsymbol{V}_b$, 表达 E_7 李代数的素根和基本主权较为方便

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{r}_1 = \sqrt{2}\,(\boldsymbol{V}_1 - \boldsymbol{V}_2)\ , && \boldsymbol{r}_2 = \sqrt{2}\,(\boldsymbol{V}_2 - \boldsymbol{V}_3)\,, \\
&\boldsymbol{r}_3 = \sqrt{2}\,(\boldsymbol{V}_3 - \boldsymbol{V}_4)\ , && \boldsymbol{r}_4 = \sqrt{2}\,(\boldsymbol{V}_4 - \boldsymbol{V}_5)\,, \\
&\boldsymbol{r}_5 = \sqrt{2}\,(\boldsymbol{V}_5 - \boldsymbol{V}_6)\ , && \boldsymbol{r}_6 = \sqrt{2}\,(\boldsymbol{V}_6 - \boldsymbol{V}_7)\,, \\
&\boldsymbol{r}_7 = \sqrt{2}\,(\boldsymbol{V}_4 + \boldsymbol{V}_5 + \boldsymbol{V}_6 + \boldsymbol{V}_7)\ , && \boldsymbol{w}_1 = \sqrt{2}\,(\boldsymbol{V}_1 - \boldsymbol{V}_8)\,, \\
&\boldsymbol{w}_2 = \sqrt{2}\,(\boldsymbol{V}_1 + \boldsymbol{V}_2 - 2\boldsymbol{V}_8)\ , && \boldsymbol{w}_3 = \sqrt{2}\,(\boldsymbol{V}_1 + \boldsymbol{V}_2 + \boldsymbol{V}_3 - 3\boldsymbol{V}_8)\,, \\
&\boldsymbol{w}_4 = -\sqrt{2}\,(\boldsymbol{V}_5 + \boldsymbol{V}_6 + \boldsymbol{V}_7 + 3\boldsymbol{V}_8)\ , && \boldsymbol{w}_5 = -\sqrt{2}\,(\boldsymbol{V}_6 + \boldsymbol{V}_7 + 2\boldsymbol{V}_8)\,, \\
&\boldsymbol{w}_6 = -\sqrt{2}\,(\boldsymbol{V}_7 + \boldsymbol{V}_8)\ , && \boldsymbol{w}_7 = -2\sqrt{2}\boldsymbol{V}_8
\end{aligned} \tag{A29.26}$$

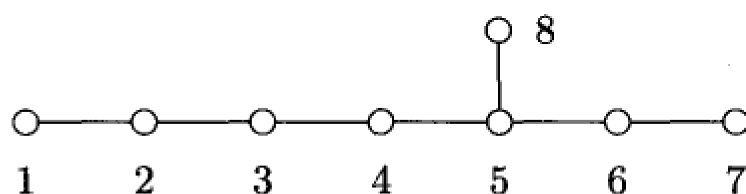
E_7 李代数的阶为 133, 共有 126 个根. 它包含 A_7 李代数的全部 56 个根 $\sqrt{2}(\boldsymbol{V}_a - \boldsymbol{V}_b)$, 还有如下形式的 70 个根

$$\sqrt{2}\,(\boldsymbol{V}_a + \boldsymbol{V}_b + \boldsymbol{V}_c + \boldsymbol{V}_d)$$

其中, a, b, c 和 d 互不相等地取 $1 \sim 8$ 中任意四个数值. A_7 是 E_7 的子李代数, 但不是理想.

九、E_8 李代数

E_8 李代数的邓金图, 嘉当矩阵及其逆矩阵和主要参数如下:



$$A = \begin{pmatrix}
2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & -1 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 2
\end{pmatrix}$$

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 4 & 2 & 3 \\ 3 & 6 & 8 & 10 & 12 & 8 & 4 & 6 \\ 4 & 8 & 12 & 15 & 18 & 12 & 6 & 9 \\ 5 & 10 & 15 & 20 & 24 & 16 & 8 & 12 \\ 6 & 12 & 18 & 24 & 30 & 20 & 10 & 15 \\ 4 & 8 & 12 & 16 & 20 & 14 & 7 & 10 \\ 2 & 4 & 6 & 8 & 10 & 7 & 4 & 5 \\ 3 & 6 & 9 & 12 & 15 & 10 & 5 & 8 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} &d_\mu = 1, \qquad 1 \leqslant \mu \leqslant 8, \qquad \boldsymbol{M}_0 = \boldsymbol{M}_{\text{adj}} = \boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{w}_1, \\ &d(\boldsymbol{M}_0) = 248, \qquad C_2(\boldsymbol{M}_{\text{adj}}) = 60 \end{aligned} \tag{A29.27}$$

采用八维空间直角坐标系的正交基 $\boldsymbol{e}_\mu$, $1 \leqslant \mu \leqslant 8$, 表达 E_8 李代数的素根和基本主权较为方便

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{e}_2 - \boldsymbol{e}_3, \qquad \boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{e}_3 - \boldsymbol{e}_4, \qquad \boldsymbol{r}_3 = \boldsymbol{e}_4 - \boldsymbol{e}_5, \\ &\boldsymbol{r}_4 = \boldsymbol{e}_5 - \boldsymbol{e}_6, \qquad \boldsymbol{r}_5 = \boldsymbol{e}_6 - \boldsymbol{e}_7, \qquad \boldsymbol{r}_6 = \boldsymbol{e}_7 - \boldsymbol{e}_8, \\ &\boldsymbol{r}_7 = 2^{-1}\left\{\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_8 - \sum_{j=2}^{7} \boldsymbol{e}_j\right\}, \qquad \boldsymbol{r}_8 = \boldsymbol{e}_7 + \boldsymbol{e}_8, \\ &\boldsymbol{w}_1 = \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2, \qquad \boldsymbol{w}_2 = 2\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3, \\ &\boldsymbol{w}_3 = 3\boldsymbol{e}_1 + \sum_{j=2}^{4} \boldsymbol{e}_j, \qquad \boldsymbol{w}_4 = 4\boldsymbol{e}_1 + \sum_{j=2}^{5} \boldsymbol{e}_j, \\ &\boldsymbol{w}_5 = 5\boldsymbol{e}_1 + \sum_{j=2}^{6} \boldsymbol{e}_j, \qquad \boldsymbol{w}_6 = \frac{7}{2}\boldsymbol{e}_1 + \frac{1}{2}\sum_{j=2}^{7} \boldsymbol{e}_j - \frac{1}{2}\boldsymbol{e}_8, \\ &\boldsymbol{w}_7 = 2\boldsymbol{e}_1, \qquad \boldsymbol{w}_8 = \frac{5}{2}\boldsymbol{e}_1 + \frac{1}{2}\sum_{j=2}^{8} \boldsymbol{e}_j \end{aligned} \tag{A29.28}$$

E_8 李代数的阶为 248, 共有 240 个根. 它包含 D_8 李代数的全部 112 个根, 即 $\pm(\boldsymbol{e}_\mu + \boldsymbol{e}_\nu)$ 和 $(\boldsymbol{e}_\mu - \boldsymbol{e}_\nu)$, 还有如下形式的 128 个根

$$(\pm \boldsymbol{e}_1 \pm \boldsymbol{e}_2 \pm \boldsymbol{e}_3 \pm \boldsymbol{e}_4 \pm \boldsymbol{e}_5 \pm \boldsymbol{e}_6 \pm \boldsymbol{e}_7 \pm \boldsymbol{e}_8)/2$$

其中, 括号内取偶数个负号. D_8 是 E_8 的子代数, 但不是理想.

附录 30　克莱布施–戈登系数的对称性质

第四章我们研究过 SU(2) 群克莱布施 – 戈登系数的对称性质式 (4.143). 这些对称性质有一定的普遍意义, 但由于单纯李代数的表示中存在重权, 使公式变得比

较复杂. 这里我们研究式 (4.143) 中两个比较简单的对称性, 而且假定表示 $\boldsymbol{M}$ 重数为 1.

第一个对称关系与交换直乘表示的乘积次序有关. 克莱布施 - 戈登系数通常都用展开式 (7.195) 的方式给出. 当把表示乘积次序颠倒时, 展开式不会发生变化, 所有的差别来自于克莱布施 - 戈登系数相位的规定, 因而它们最多只能相差一个符号

$$C^{\boldsymbol{M}^{(2)}\boldsymbol{M}^{(1)}}_{\boldsymbol{m}^{(2)},\boldsymbol{m}^{(1)},\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}} = \xi_{\boldsymbol{M}} C^{\boldsymbol{M}^{(1)}\boldsymbol{M}^{(2)}}_{\boldsymbol{m}^{(1)},\boldsymbol{m}^{(2)},\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}} \tag{A30.1}$$

因子 $\xi_{\boldsymbol{M}} = \pm 1$ 取决于在最高权态 ($\boldsymbol{m} = \boldsymbol{M}$) 的展开式 (7.195) 中, 两种选取相因子方法. 例如, 在 $D^{\boldsymbol{M}^{(1)}} \times D^{\boldsymbol{M}^{(2)}}$ 约化中选取展开式的项 $\boldsymbol{m}^{(1)} = \boldsymbol{M}^{(1)}$ 系数为正实数, 而在 $D^{\boldsymbol{M}^{(2)}} \times D^{\boldsymbol{M}^{(1)}}$ 约化中选取项 $\boldsymbol{m}^{(2)} = \boldsymbol{M}^{(2)}$ 系数为正实数, 则根据最高权态在升算符作用下为零的条件, 得

$$\xi_{\boldsymbol{M}} = (-1)^{h(\boldsymbol{M}^{(2)},\boldsymbol{M}-\boldsymbol{M}^{(1)})} = (-1)^{h(\boldsymbol{M}^{(1)},\boldsymbol{M}-\boldsymbol{M}^{(2)})} \tag{A30.2}$$

其中, $h(\boldsymbol{M},\boldsymbol{m})$ 是权 $\boldsymbol{m}$ 在表示 $\boldsymbol{M}$ 中的高度 [见式 (7.159)].

第二个对称关系与复共轭表示有关. 互为复共轭的表示状态基和生成元满足式 (7.160) 和 (7.161). 由于式 (7.195) 每一项中两个权高度之和是相同的

$$h(\boldsymbol{M}^{(1)},\boldsymbol{m}^{(1)}) + h(\boldsymbol{M}^{(2)},\boldsymbol{m}^{(2)}) \tag{A30.3}$$

有关高度的因子可以提到求和号外面来. 如果克莱布施 - 戈登系数是实的, 对式 (7.195) 取复共轭知, $C^{\boldsymbol{M}^{(1)*}\boldsymbol{M}^{(2)*}}_{\boldsymbol{M}^*}$ 和 $C^{\boldsymbol{M}^{(1)}\boldsymbol{M}^{(2)}}_{\boldsymbol{M}}$ 都把直乘表示 $\boldsymbol{M}^{(1)*} \times \boldsymbol{M}^{(2)*}$ 约化到表示 $\boldsymbol{M}^*$, 根据舒尔定理它们只能相差一个与 $\boldsymbol{m}$ 无关的常数 $\zeta_{\boldsymbol{M}}$

$$\begin{aligned} C^{\boldsymbol{M}^{(1)*}\boldsymbol{M}^{(2)*}}_{-\boldsymbol{m}^{(1)},-\boldsymbol{m}^{(2)},\boldsymbol{M}^*,-\boldsymbol{m}} &= \zeta_{\boldsymbol{M}} C^{\boldsymbol{M}^{(1)}\boldsymbol{M}^{(2)}}_{\boldsymbol{m}^{(1)},\boldsymbol{m}^{(2)},\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}} \\ \zeta_{\boldsymbol{M}} &= (-1)^{h(\boldsymbol{M}^{(1)},\boldsymbol{m}^{(1)})+h(\boldsymbol{M}^{(2)},\boldsymbol{m}^{(2)})-h(\boldsymbol{M},\boldsymbol{m})} \end{aligned} \tag{A30.4}$$

取 $\boldsymbol{m} = \boldsymbol{M}$ 和 $\boldsymbol{m}^{(1)} = \boldsymbol{M}^{(1)}$, 得

$$h(\boldsymbol{M}^{(1)},\boldsymbol{m}^{(1)}) + h(\boldsymbol{M}^{(2)},\boldsymbol{m}^{(2)}) - h(\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}) = h[\boldsymbol{M}^{(2)},(\boldsymbol{M}-\boldsymbol{M}^{(1)})] \tag{A30.5}$$

因此, 一般说来, $\xi_{\boldsymbol{M}} = \zeta_{\boldsymbol{M}}$,

$$\begin{aligned} C^{\boldsymbol{M}^{(1)}\boldsymbol{M}^{(2)}}_{\boldsymbol{m}^{(1)},\boldsymbol{m}^{(2)},\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}} &= \xi_{\boldsymbol{M}} C^{\boldsymbol{M}^{(2)}\boldsymbol{M}^{(1)}}_{\boldsymbol{m}^{(2)},\boldsymbol{m}^{(1)},\boldsymbol{M},\boldsymbol{m}} = \xi_{\boldsymbol{M}} C^{\boldsymbol{M}^{(1)*}\boldsymbol{M}^{(2)*}}_{-\boldsymbol{m}^{(1)},-\boldsymbol{m}^{(2)},\boldsymbol{M}^*,-\boldsymbol{m}} \\ &= C^{\boldsymbol{M}^{(2)*}\boldsymbol{M}^{(1)*}}_{-\boldsymbol{m}^{(2)},-\boldsymbol{m}^{(1)},\boldsymbol{M}^*,-\boldsymbol{m}} \end{aligned} \tag{A30.6}$$

当参与直乘的表示互为复共轭表示时, $\boldsymbol{M}^{(2)} = \boldsymbol{M}^{(1)*}$, 克莱布施 - 戈登级数中有一个恒等表示 $\boldsymbol{0}$, 它的状态展开式为

$$||\boldsymbol{0},\boldsymbol{0}\rangle = \left(d_{\boldsymbol{M}^{(1)}}\right)^{-1/2} \sum_{\boldsymbol{m}} (-1)^{h(\boldsymbol{M}^{(1)},\boldsymbol{m})} \, |\boldsymbol{M}^{(1)},\boldsymbol{m}\rangle \, |\boldsymbol{M}^{(1)*},-\boldsymbol{m}\rangle \tag{A30.7}$$

附录 31　SU(3) 群两伴随表示直乘的克莱布施 - 戈登系数

7.7 节已计算了 SU(3) 群两伴随表示直乘的克莱布施 - 戈登级数和级数中各表示最高权态的展开式. 现在用方块权图方法和降算符作用, 计算其他权态的展开式, 即计算克莱布施 - 戈登系数. 表示 (2,2) 的最高权态为

$$||(2,2),(2,2)\rangle \;=\; |(1,1)\rangle|(1,1)\rangle$$

它对乘积状态是对称的. 由于最高权中两个分量都是正的, 可得一个 $\mathcal{A}_1$ 三重态和一个 $\mathcal{A}_2$ 三重态. 用降算符作用得

$$\begin{aligned}
&||(2,2),(0,3)\rangle = \sqrt{1/2}\;F_1||(2,2),(2,2)\rangle = \sqrt{1/2}\left\{\;|(1,1)\rangle|(\overline{1},2)\rangle + |(\overline{1},2)\rangle|(1,1)\rangle\;\right\},\\
&||(2,2),(\overline{2},4)\rangle = \sqrt{1/2}\;F_1||(2,2),(0,3)\rangle = |(\overline{1},2)\rangle|(\overline{1},2)\rangle,\\
&||(2,2),(3,0)\rangle = \sqrt{1/2}\;F_2||(2,2),(2,2)\rangle = \sqrt{1/2}\left\{|(1,1)\rangle|(2,\overline{1})\rangle + |(2,\overline{1})\rangle|(1,1)\rangle\;\right\},\\
&||(2,2),(4,\overline{2})\rangle = \sqrt{1/2}\;F_2||(2,2),(3,0)\rangle = |(2,\overline{1})\rangle|(2,\overline{1})\rangle
\end{aligned}$$

其中, 出现两个主权 (0,3) 和 (3,0), 它们分别与最高权属于同一个 $\mathcal{A}_\mu$ 多重态, 因而是单权. 与它们等价的权也是单权, 分别是

$$(0,3),\quad (3,\overline{3}),\quad (\overline{3},0)\;\;\text{和}\;\;(3,0),\quad (\overline{3},3),\quad (0,\overline{3})$$

由权 (0,3) 可得一个 $\mathcal{A}_2$ 四重态, 包含的权有 (0,3), (1,1), $(2,\overline{1})$ 和 $(3,\overline{3})$. 由权 (3,0) 可得一个 $\mathcal{A}_1$ 四重态, 包含的权有 (3,0), (1,1), $(\overline{1},2)$ 和 $(\overline{3},3)$. 两个四重态中都包含主权 (1,1), 它可能是二重权. 设态 $(1,1)_1$ 属于 $\mathcal{A}_1$ 四重态, $(1,1)_2$ 只能属于 $\mathcal{A}_1$ 二重态.

$$\begin{aligned}
&||(2,2),(1,1)_1\rangle = \sqrt{1/3}\;F_1||(2,2),(3,0)\rangle\\
&\quad = \sqrt{1/6}\;\left\{\;\sqrt{2}|(1,1)\rangle|(0,0)_1\rangle + |(\overline{1},2)\rangle|(2,\overline{1})\rangle + (\text{sym. terms})\;\right\},\\
&E_1||(2,2),(1,1)_2\rangle = 0
\end{aligned}$$

其中, (sym. terms) 代表一些对称项, 它们由前面各项交换两状态基乘积次序得到. 在上式中它代表

$$\sqrt{1/6}\;\left\{\sqrt{2}|(0,0)_1\rangle|(1,1)\rangle + |(2,\overline{1})\rangle|(\overline{1},2)\rangle\;\right\}$$

如果是 (antisym. terms), 则代表一些反对称项, 即相差负号的项, 今后不再加以说明了. 设

$$\begin{aligned}
&F_2||(2,2),(0,3)\rangle = a_1\;||(2,2),(1,1)_1\rangle + a_2\;||(2,2),(1,1)_2\rangle\\
&\quad = 2^{-1}\left\{|(1,1)\rangle|(0,0)_1\rangle + \sqrt{3}\;|(1,1)\rangle|(0,0)_2\rangle + \sqrt{2}\;|(2,\overline{1})\rangle|(\overline{1},2)\rangle + (\text{sym. terms})\right\}
\end{aligned}$$

有两种方法来计算系数 a_1 和 a_2. 一种是画方块权图时常用的方法, 利用 E_1 和 F_2 对易

$$\begin{aligned} E_1F_2 \,||(2,2),(0,3)\rangle &= \sqrt{3}\, a_1 \,||(2,2),(3,0)\rangle \\ &= F_2E_1 \,||(2,2),(0,3)\rangle = 2\,||(2,2),(3,0)\rangle \end{aligned}$$

定出 $a_1 = \sqrt{4/3}$. 选择状态基 $||(2,2),(1,1)_2\rangle$ 的相位, 使 a_2 是正实数, 得 $a_2 = \left\{3-a_1^2\right\}^{1/2} = \sqrt{5/3}$. 因此主权 $(1,1)$ 是二重权, 并算得

$$\begin{aligned} ||(2,2),(1,1)_2\rangle &= \sqrt{3/5}\left\{F_2||(2,2),(0,3)\rangle - \sqrt{4/3}||(2,2),(1,1)_1\rangle\right\} \\ &= \sqrt{1/60}\ \{\, -|(1,1)\rangle\,|(0,0)_1\rangle + \sqrt{27}\,|(1,1)\rangle|(0,0)_2\rangle \\ &\quad + \sqrt{2}\,|(2,\overline{1})\rangle|(\overline{1},2)\rangle + (\text{sym. terms})\,\} \end{aligned}$$

另一方法是利用克莱布施 - 戈登系数的正交性

$$\begin{aligned} a_1 &= \langle(2,2),(1,1)_1||\ F_2\ ||(2,2),(0,3)\rangle \\ &= \sqrt{1/24}\ \{\ \sqrt{2}+\sqrt{2}+\sqrt{2}+\sqrt{2}\ \} = \sqrt{4/3} \end{aligned}$$

a_2 也可根据归一化条件和相位选择来确定

$$\begin{aligned} &a_2\,||(2,2),(1,1)_2\rangle = F_2\,||(2,2),(0,3)\rangle - \sqrt{4/3}\,||(2,2),(1,1)_1\rangle \\ &\quad = 6^{-1}\ \{-|(1,1)\rangle|(0,0)_1\rangle + \sqrt{27}\,|(1,1)\rangle|(0,0)_2\rangle + \sqrt{2}\,|(2,\overline{1})\rangle|(\overline{1},2)\rangle \\ &\qquad + (\text{sym. terms})\} \end{aligned}$$

归一化后得 $a_2 = \sqrt{5/3}$. 两种方法都可选用, 但这里尽量采用新方法.

继续上面两个多重态的计算. 所有与主权 $(1,1)$ 等价的权都是二重权

$$(1,1),\quad (\overline{1},2),\quad (2,\overline{1}),\quad (1,\overline{2}),\quad (\overline{2},1),\quad (\overline{1},\overline{1}) \qquad .$$

选择 $(\overline{1},2)_1$ 和 $(\overline{1},2)_2$ 分别属于前面确定的 $\mathcal{A}_1$ 四重态和二重态, 得

$$\begin{aligned} ||(2,2),(\overline{1},2)_1\rangle &= 2^{-1}\ F_1\,||(2,2),(1,1)_1\rangle \\ &= \sqrt{1/6}\ \{|(1,1)\rangle|(\overline{2},1)\rangle + \sqrt{2}\,|(\overline{1},2)\rangle|(0,0)_1\rangle + (\text{sym. terms})\ \}, \\ ||(2,2),(\overline{3},3)\rangle &= \sqrt{1/3}\,F_1\,||(2,2),(\overline{1},2)_1\rangle \\ &= \sqrt{1/2}\ \{\ |(\overline{1},2)\rangle|(\overline{2},1)\rangle + |(\overline{2},1)\rangle|(\overline{1},2)\rangle\ \}, \\ ||(2,2),(\overline{1},2)_2\rangle &= F_1\,||(2,2),(1,1)_2\rangle \\ &= \sqrt{1/60}\ \{-\sqrt{2}\,|(1,1)\rangle|(\overline{2},1)\rangle + \ |(\overline{1},2)\rangle\ |(0,0)_1\rangle \\ &\quad +\sqrt{27}\,|(\overline{1},2)\rangle|(0,0)_2\rangle + \ (\text{sym. terms})\ \} \end{aligned}$$

权为 $(\overline{1},2)$ 的两状态基确实是互相正交的. 再计算降算符对高度为 2 的其他态的作用. 利用状态基的正交性可得

$$\begin{aligned}F_2\ \|(2,2),(\overline{2},4)\rangle &= \sqrt{1/2}\left\{\ |(\overline{1},2)\rangle|(0,0)_1\rangle + \sqrt{3}\ |(\overline{1},2)\rangle\ |(0,0)_2\rangle + (\text{sym. terms})\right\}\\ &= \sqrt{2/3}\ \|(2,2),(\overline{1},2)_1\rangle + \sqrt{10/3}\ \|(2,2),(\overline{1},2)_2\rangle\end{aligned}$$

让 $(2,\overline{1})_1$ 属于由 $(4,\overline{2})$ 构造的 $\mathcal{A}_1$ 五重态, 而 $(2,\overline{1})_2$ 只能属于 $\mathcal{A}_1$ 三重态

$$\|(2,2),(2,\overline{1})_1\rangle = 2^{-1}F_1\ \|(2,2),(4,\overline{2})\rangle = \sqrt{1/2}\left\{\ |(2,\overline{1})\rangle|(0,0)_1\rangle + |(0,0)_1\rangle|(2,\overline{1})\rangle\right\},$$
$$E_1\ \|(2,2),(2,\overline{1})_2\rangle = 0$$

设

$$\begin{aligned}F_2\ \|(2,2),(1,1)_1\rangle &= b_1\ \|(2,2),(2,\overline{1})_1\rangle + b_2\|(2,2),(2,\overline{1})_2\rangle\\ &= \sqrt{1/6}\ \Big\{\ |(1,1)\rangle|(1,\overline{2})\rangle + 3\sqrt{1/2}\ |(2,\overline{1})\rangle\rangle|(0,0)_1\rangle\\ &\quad + \sqrt{3/2}\ |(2,\overline{1})\rangle\rangle|(0,0)_2\rangle + (\text{sym. terms})\ \Big\},\\ F_2\ \|(2,2),(1,1)_2\rangle &= b_3\ \|(2,2),(2,\overline{1})_1\rangle + b_4\ \|(2,2),(2,\overline{1})_2\rangle\\ &= \sqrt{4/15}\left\{\sqrt{2}|(1,1)\rangle|(1,\overline{2})\rangle + \sqrt{3}|(2,\overline{1})\rangle|(0,0)_2\rangle + (\text{sym. terms})\right\}\end{aligned}$$

由正交性定出

$$\begin{aligned}b_1 &= \langle(2,2),(2,\overline{1})_1\|F_2\|(2,2),(1,1)_1\rangle = \sqrt{3/2},\\ b_3 &= \langle(2,2),(2,\overline{1})_1\|F_2\|(2,2),(1,1)_2\rangle = 0\end{aligned}$$

选择状态基 $\|(2,2),(2,\overline{1})_2\rangle$ 的归一化系数, 得 $b_4 = \sqrt{8/3}$ 和

$$\begin{aligned}\|(2,2),(2,\overline{1})_2\rangle &= \sqrt{3/8}F_2\ \|(2,2),(1,1)_2\rangle\\ &= \sqrt{1/10}\left\{\sqrt{2}|(1,1)\rangle|(1,\overline{2})\rangle + \sqrt{3}|(2,\overline{1})\rangle|(0,0)_2\rangle + (\text{sym. terms})\right\}\end{aligned}$$

由此算得

$$b_2 = \langle(2,2),(2,\overline{1})_2\|F_2\|(2,2),(1,1)_1\rangle = \sqrt{5/6}$$

在高度为 4 的权中, 有两个单权 $(\overline{3},3)$ 和 $(3,\overline{3})$ 是很明显的. 一个单权 $(\overline{3},3)$ 的状态基展开式已经计算过, 另一个单权 $(3,\overline{3})$ 的状态基也容易计算

$$\begin{aligned}F_2\ \|(2,2),(2,\overline{1})_1\ \rangle &= 2^{-1}\left\{\ |(2,\overline{1})\rangle|(1,\overline{2})\rangle + |(1,\overline{2})\rangle\ |(2,\overline{1})\rangle\ \right\}\\ &= \sqrt{1/2}\ \|(2,2),(3,\overline{3})\rangle,\\ F_2\ \|(2,2),(2,\overline{1})_2\rangle &= \sqrt{5/4}\left\{\ |(2,\overline{1})\rangle|(1,\overline{2})\rangle + |(1,\overline{2})\rangle\ |(2,\overline{1})\rangle\ \right\}\\ &= \sqrt{5/2}\ \|(2,2),(3,\overline{3})\rangle,\end{aligned}$$

$$||(2,2),(3,\overline{3})\rangle = \sqrt{1/2}\ \left\{\ |(2,\overline{1})\rangle|(1,\overline{2})\rangle + |(1,\overline{2})\rangle\ |(2,\overline{1})\rangle\ \right\}$$

可以验算

$$\begin{aligned}
&F_2^3||(2,2),(0,3)\rangle \\
&= F_2^2\ \left\{\ \sqrt{4/3}\ ||(2,2),(1,1)_1\rangle + \sqrt{5/3}\ ||(2,2),(1,1)_2\rangle\ \right\} \\
&= \sqrt{4/3}\ F_2\left\{\sqrt{3/2}\ ||(2,2),(2,\overline{1})_1\rangle + \sqrt{5/6}\ ||(2,2),(2,\overline{1})_2\rangle\ \right\} \\
&\quad + \sqrt{5/3}\sqrt{8/3}\ F_2\ ||(2,2),(2,\overline{1})_2\rangle \\
&= 6\ ||(2,2),(3,\overline{3})\rangle
\end{aligned}$$

把 F_1 作用到状态基 $||(2,2),(2,\overline{1})_1\rangle$ 和 $||(2,2),(2,\overline{1})_2\rangle$ 上会得到 $(0,0)$ 权的态，把 F_2 作用到状态基 $||(2,2),(\overline{1},2)_1\rangle$ 和 $||(2,2),(\overline{1},2)_2\rangle$ 上也会得到 $(0,0)$ 权的态. 既然主权 $(0,0)$ 可由四条路径得到，我们应该先假设 $(0,0)$ 权是四重权. 让 $(0,0)_1$ 属于由 $(4,\overline{2})$ 构造的 $\mathcal{A}_1$ 五重态，$(0,0)_2$ 属于由 $(2,\overline{1})_2$ 构造的 $\mathcal{A}_1$ 三重态，而其余两个 $(0,0)_3$ 和 $(0,0)_4$ 分属于 $\mathcal{A}_1$ 单态

$$\begin{aligned}
||(2,2),(0,0)_1\rangle &= \sqrt{1/6}\ F_1\ ||(2,2),(2,1)_1\rangle \\
&= \sqrt{1/6}\ \left\{\ |(2,\overline{1})\rangle\ |(\overline{2},1)\rangle + 2\ |(0,0)_1\rangle\ |(0,0)_1\rangle + |(\overline{2},1)\rangle\ |(2,\overline{1})\rangle\ \right\}, \\
||(2,2),(0,0)_2\rangle &= \sqrt{1/2}\ F_1\ ||(2,2),(2,1)_2\rangle \\
&= \sqrt{1/10}\ \left\{\ |(1,1)\rangle\ |(\overline{1},\overline{1})\rangle + |(\overline{1},2)\rangle\ |(1,\overline{2})\rangle + \sqrt{3}\ |(0,0)_1\rangle\ |(0,0)_2\rangle\right. \\
&\qquad \left. + \text{(sym. terms)}\right\}, \\
E_1\ ||(2,2),(0,0)_3\rangle &= E_1\ ||(2,2),(0,0)_4\rangle = 0
\end{aligned}$$

它们确实是互相正交的. 令

$$\begin{aligned}
F_2\ ||(2,2),(\overline{1},2)_1\rangle &= c_1\ ||(2,2),(0,0)_1\rangle + c_2\ ||(2,2),(0,0)_2\rangle \\
&\quad + c_3\ ||(2,2),(0,0)_3\rangle + c_4\ ||(2,2),(0,0)_4\rangle \\
&= \sqrt{1/6}\ \left\{|(1,1)\rangle|(\overline{1},\overline{1})\rangle + |(2,\overline{1})\rangle|(\overline{2},1)\rangle + |(\overline{1},2)\rangle|(1,\overline{2})\rangle\right. \\
&\quad \left. +\sqrt{3}\ |(0,0)_2\rangle|(0,0)_1\rangle + \text{(sym. terms)} + 2\ |(0,0)_1\rangle|(0,0)_1\rangle\ \right\}, \\
F_2\ ||(2,2),(\overline{1},2)_2\rangle &= d_1\ ||(2,2),(0,0)_1\rangle + d_2\ ||(2,2),(0,0)_2\rangle \\
&\quad + d_3\ ||(2,2),(0,0)_3\rangle + d_4\ ||(2,2),(0,0)_4\rangle \\
&= \sqrt{1/60}\ \left\{-\sqrt{2}\ |(1,1)\rangle|(\overline{1},\overline{1})\rangle - \sqrt{2}\ |(2,\overline{1})\rangle|(\overline{2},1)\rangle + 5\sqrt{2}\ |(\overline{1},2)\rangle|(1,\overline{2})\rangle\right. \\
&\quad +2\sqrt{6}\ |(0,0)_1\rangle|(0,0)_2\rangle + \text{(sym. terms)} \\
&\quad \left. +\sqrt{2}\ |(0,0)_1\rangle|(0,0)_1\rangle + 9\sqrt{2}\ |(0,0)_2\rangle|(0,0)_2\rangle\ \right\}
\end{aligned}$$

由正交性定出

$$
\begin{aligned}
c_1 &= \langle(2,2),(0,0)_1||F_2||(2,2),(\bar{1},2)_1\rangle = 1, \\
c_2 &= \langle(2,2),(0,0)_2||F_2||(2,2),(\bar{1},2)_1\rangle = \sqrt{5/3}, \\
d_1 &= \langle(2,2),(0,0)_1||F_2||(2,2),(\bar{1},2)_2\rangle = 0, \\
d_2 &= \langle(2,2),(0,0)_2||F_2||(2,2),(\bar{1},2)_2\rangle = \sqrt{4/3}
\end{aligned}
$$

代入上式得

$$
\begin{aligned}
F_2\ ||(2,2),(\bar{1},2)_1\rangle = &\sqrt{1/6}\ \{|(2,\bar{1})\rangle|(\bar{2},1)\rangle + (\text{sym. terms}) + 2\ |(0,0)_1\rangle|(0,0)_1\rangle\ \} \\
&+\sqrt{5/3}\ \sqrt{1/10}\ \{|(1,1)\rangle|(\bar{1},\bar{1})\rangle + |(\bar{1},2)\rangle|(1,\bar{2})\rangle \\
&+\sqrt{3}\ |(0,0)_2\rangle|(0,0)_1\rangle + (\text{sym. terms})\ \} \\
= &\ ||(2,2),(0,0)_1\rangle + \sqrt{5/3}\ ||(2,2),(0,0)_2\rangle
\end{aligned}
$$

即 $c_3 = c_4 = 0$. 可见权 $(0,0)$ 是三重态, 取 $d_4 = 0$, 得

$$
\begin{aligned}
d_3\ ||(2,2),(0,0)_3\rangle &= F_2\ ||(2,2),(\bar{1},2)_2\rangle - \sqrt{4/3}\ ||(2,2),(0,0)_2\rangle \\
&= \sqrt{1/60}\ \{-\sqrt{2}\ |(1,1)\rangle|(\bar{1},\bar{1})\rangle - \sqrt{2}\ |(2,\bar{1})\rangle|(\bar{2},1)\rangle + 5\sqrt{2}\ |(\bar{1},2)\rangle|(1,\bar{2})\rangle \\
&\quad +2\sqrt{6}\ |(0,0)_1\rangle|(0,0)_2\rangle + (\text{sym. terms}) \\
&\quad +\sqrt{2}\ |(0,0)_1\rangle|(0,0)_1\rangle + 9\sqrt{2}\ |(0,0)_2\rangle|(0,0)_2\rangle\ \} \\
&\quad -\sqrt{2/15}\ \{\ |(1,1)\rangle\ |(\bar{1},\bar{1})\rangle + |(\bar{1},2)\rangle\ |(1,\bar{2})\rangle + \sqrt{3}\ |(0,0)_1\rangle\ |(0,0)_2\rangle \\
&\quad + (\text{sym. terms})\} \\
&= 2\times\sqrt{1/120}\ \{-3|(1,1)\rangle\ |(\bar{1},\bar{1})\rangle - |(2,\bar{1})\rangle|(\bar{2},1)\rangle + 3\ |(\bar{1},2)\rangle\ |(1,\bar{2})\rangle \\
&\quad + (\text{sym. terms}) + |(0,0)_1\rangle\ |(0,0)_1\rangle + 9\ |(0,0)_2\rangle\ |(0,0)_2\rangle\ \}
\end{aligned}
$$

把状态基归一化后, 得 $d_3 = 2$,

$$
\begin{aligned}
||(2,2),(0,0)_3\rangle = &\sqrt{1/120}\ \{-3|(1,1)\rangle\ |(\bar{1},\bar{1})\rangle - |(2,\bar{1})\rangle|(\bar{2},1)\rangle + 3\ |(\bar{1},2)\rangle\ |(1,\bar{2})\rangle \\
&+ (\text{sym. terms}) + |(0,0)_1\rangle\ |(0,0)_1\rangle + 9\ |(0,0)_2\rangle\ |(0,0)_2\rangle\ \}
\end{aligned}
$$

它正交于另两个权为 $(0,0)$ 的状态基. 表示 (2, 2) 的方块权图是上下对称的, 见图 A31.1. 余下的状态基展开式可类似计算.

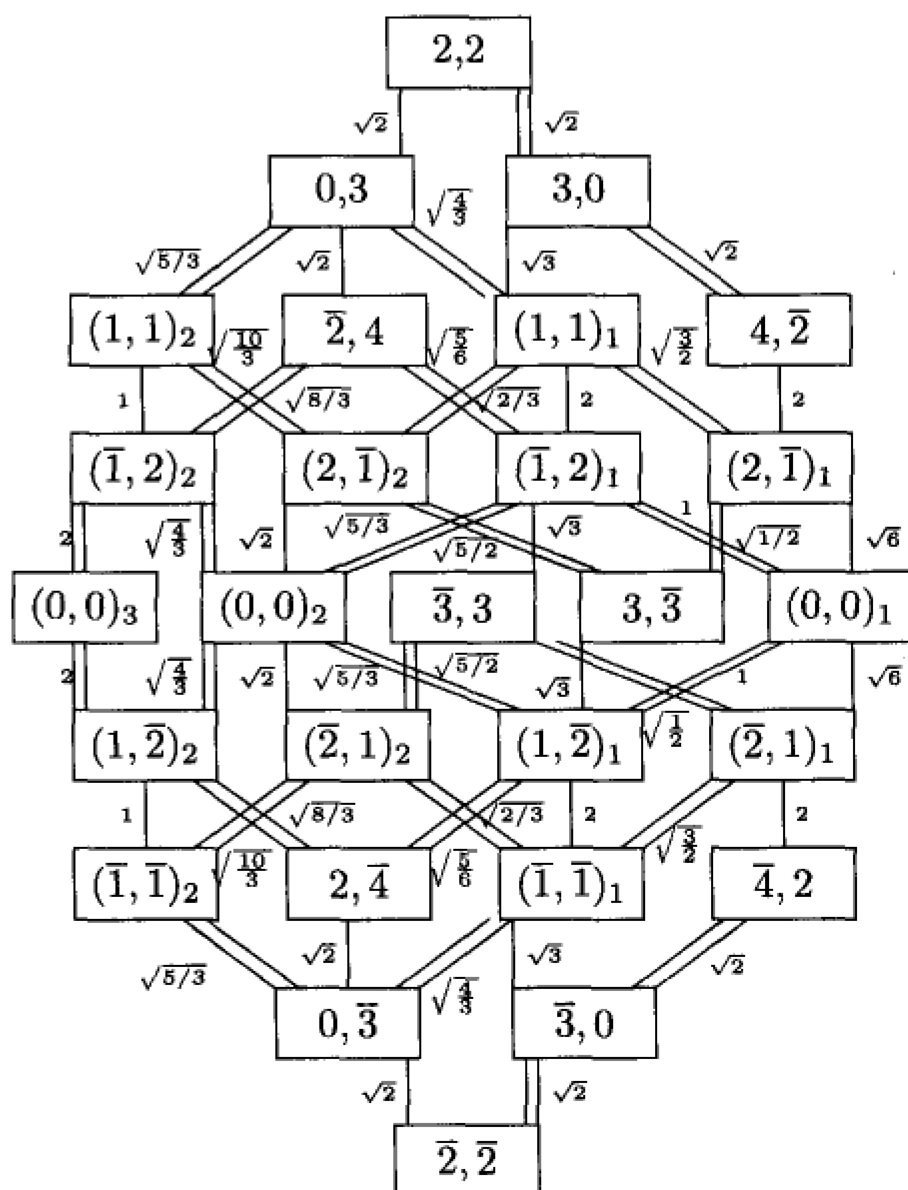


图 A31.1　SU(3) 群表示 (2,2) 的方块权图

$$
\begin{aligned}
\|(2,2),(\overline{2},1)_1\rangle &= \sqrt{1/6}F_1\ \|(2,2),(0,0)_1\rangle \\
&= \sqrt{1/2}\left\{|(0,0)_1\rangle|(\overline{2},1)\rangle+|(\overline{2},1)\rangle|(0,0)_1\rangle\right\}, \\
\|(2,2),(\overline{4},2)\rangle &= (1/2)F_1\ \|(2,2),(\overline{2},1)_1\rangle=|(\overline{2},1)\rangle|(\overline{2},1)\rangle, \\
\|(2,2),(\overline{2},1)_2\rangle &= \sqrt{1/2}F_1\ \|(2,2),(0,0)_2\rangle \\
&= \sqrt{1/10}\left\{\sqrt{2}|(\overline{1},2)\rangle|(\overline{1},\overline{1})\rangle+\sqrt{3}|(\overline{2},1)\rangle|(0,0)_2\rangle+(\text{sym. terms})\right\}, \\
\|(2,2),(1,\overline{2})_1\rangle &= \sqrt{1/3}F_1\ \|(2,2),(3,\overline{3})\rangle \\
&= \sqrt{1/6}\ \left\{\ |(2,\overline{1})\rangle|(\overline{1},\overline{1})\rangle+\sqrt{2}\ |(0,0)_1\rangle|(1,\overline{2})\rangle+\ (\text{sym. terms})\right\}, \\
\|(2,2),(\overline{1},\overline{1})_1\rangle &= (1/2)F_1\ \|(2,2),(1,\overline{2})_1\rangle \\
&= \sqrt{1/6}\ \left\{\sqrt{2}\ |(0,0)_1\rangle|(\overline{1},\overline{1})\rangle+|(\overline{2},1)\rangle|(1,\overline{2})\rangle+\ (\text{sym. terms})\right\}, \\
\|(2,2),(\overline{3},0)\rangle &= \sqrt{1/3}F_1\ \|(2,2),(\overline{1},\overline{1})_1\rangle \\
&= \sqrt{1/2}\ \left\{\sqrt{2}\ |(\overline{2},1)\rangle|(\overline{1},\overline{1})\rangle+|(\overline{1},\overline{1})\rangle|(\overline{2},1)\rangle\right\},
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
||(2,2),(1,\overline{2})_2\rangle &= (1/2)\ F_2\ ||(2,2),(0,0)_3\rangle \\
&= \sqrt{1/60}\ \{-\sqrt{2}|(2,\overline{1})\rangle\ |(\overline{1},\overline{1})\rangle +\ |(0,0)_1\rangle\ |(1,\overline{2})\rangle \\
&\quad +3\sqrt{3}\ |(0,0)_2\rangle|(1,\overline{2})\rangle +\ (\text{sym. terms})\}, \\
||(2,2),(\overline{1},\overline{1})_2\rangle &= F_1\ ||(2,2),(1,\overline{2})_2\rangle \\
&= \sqrt{1/60}\{-|(0,0)_1\rangle\ |(\overline{1},\overline{1})\rangle + 3\sqrt{3}|(0,0)_2\rangle|(\overline{1},\overline{1})\rangle + \sqrt{2}|(\overline{2},1)\rangle|(1,\overline{2})\rangle \\
&\quad +\ (\text{sym. terms})\}, \\
||(2,2),(2,\overline{4})_2\rangle &= \sqrt{3/10}F_2\ ||(2,2),(1,\overline{2})_2\rangle = |(1,\overline{2})\rangle|(1,\overline{2})\rangle, \\
||(2,2),(0,\overline{3})\rangle &= \sqrt{1/2}F_1\ ||(2,2),(2,\overline{4})_2\rangle = \sqrt{1/2}\{|(1,\overline{2})\rangle|(\overline{1},\overline{1})\rangle + |(\overline{1},\overline{1})\rangle|(1,\overline{2})\rangle\}, \\
||(2,2),(\overline{2},\overline{2})\rangle &= \sqrt{1/2}F_1\ ||(2,2),(0,\overline{3})\rangle = |(\overline{1},\overline{1})\rangle|(\overline{1},\overline{1})\rangle
\end{aligned}
$$

根据上面的计算, 知道表示 $(2,2)$ 包含如下主权: $(2,2)$, $(3,0)$ 和 $(0,3)$ 是单权, $(1,1)$ 是二重权, $(0,0)$ 是三重权.

其次, 计算表示 (3, 0) 和 (0, 3) 的状态基展开式. 最高权态的展开式已在 7.7 节中算出. 现在通过降算符的作用, 计算其他状态的展开式.

$$
\begin{aligned}
||(3,0),(3,0)\rangle &= \sqrt{1/2}\ \{\ |1,1\rangle\ |2,\overline{1}\rangle - |2,\overline{1}\rangle\ |1,1\rangle\ \}, \\
||(3,0),(1,1)\rangle &= \sqrt{1/3}\ F_1\ ||(3,0),(3,0)\rangle \\
&= \sqrt{1/6}\ \{\ \sqrt{2}\ |(1,1)\rangle|(0,0)_1\rangle + |\overline{1},2\rangle\ |2,\overline{1}\rangle + (\text{antisym. terms})\ \}, \\
||(3,0),(\overline{1},2)\rangle &= 2^{-1}\ F_1\ ||(3,0),(1,1)\rangle \\
&= \sqrt{1/6}\ \{\ |(1,1)\rangle|(\overline{2},1)\rangle + \sqrt{2}\ |\overline{1},2\rangle\ |(0,0)_1\rangle + (\text{antisym. terms})\ \}, \\
||(3,0),(\overline{3},3)\rangle &= \sqrt{1/3}\ F_1\ ||(3,0),(\overline{1},2)\rangle = \sqrt{1/2}\ \{\ |\overline{1},2\rangle|\overline{2},1\rangle - |\overline{2},1\rangle\ |\overline{1},2\rangle\}, \\
||(3,0),(2,\overline{1})\rangle &= F_2\ ||(3,0),(1,1)\rangle \\
&= \sqrt{1/12}\ \{\ \sqrt{2}\ |1,1\rangle|1,\overline{2}\rangle + |2,\overline{1}\rangle\ |(0,0)_1\rangle - \sqrt{3}\ |2,\overline{1}\rangle\ |(0,0)_2\rangle \\
&\quad +(\text{antisym. terms})\ \}, \\
||(3,0),(0,0)\rangle &= \sqrt{1/2}\ F_2\ ||(3,0),(\overline{1},2)\rangle \\
&= \sqrt{1/12}\{|1,1\rangle|\overline{1},\overline{1}\rangle + |\overline{1},2\rangle|1,\overline{2}\rangle + |2,\overline{1}\rangle|\overline{2},1\rangle - \sqrt{3}|(0,0)_1\rangle|(0,0)_2\rangle \\
&\quad +(\text{antisym. terms})\ \}, \\
||(3,0),(1,\overline{2})\rangle &= \sqrt{1/2}\ F_2\ ||(3,0),(0,0)\rangle \\
&= \sqrt{1/12}\ \{\ \sqrt{2}\ |2,\overline{1}\rangle\ |\overline{1},\overline{1}\rangle - |(0,0)_1\rangle|1,\overline{2}\rangle + \sqrt{3}\ |(0,0)_2\rangle|1,\overline{2}\rangle \\
&\quad +\ (\text{antisym. terms})\ \}, \\
||(3,0),(\overline{2},1)\rangle &= \sqrt{1/3}\ F_2\ ||(3,0),(\overline{3},3)\rangle
\end{aligned}
$$

$$= \sqrt{1/12}\ \{\ \sqrt{2}\ |\overline{1},2\rangle\ |\overline{1},\overline{1}\rangle + |(0,0)_1\rangle|\overline{2},1\rangle + \sqrt{3}\ |(0,0)_2\rangle|\overline{2},1\rangle + \text{(antisym. terms)}\ \},$$

$$||(3,0),(\overline{1},\overline{1})\rangle = 2^{-1}\ F_2\ ||(3,0),(\overline{2},1)\rangle = \sqrt{1/12}\ \{\ |(0,0)_1\rangle\ |\overline{1},\overline{1}\rangle + \sqrt{3}\ |(0,0)_2\rangle\ |\overline{1},\overline{1}\rangle - \sqrt{2}\ |\overline{2},1\rangle\ |1,\overline{2}\rangle + \text{(antisym. terms)}\ \},$$

$$||(3,0),(0,\overline{3})\rangle = \sqrt{1/3}\ F_2\ ||(3,0),(\overline{1},\overline{1})\rangle = \sqrt{1/2}\ \{\ |1,\overline{2}\rangle\ |\overline{1},\overline{1}\rangle - |\overline{1},\overline{1}\rangle|1,\overline{2}\rangle\ \}$$

$(0,3)$ 表示的状态展开式可类似得到, 结果也很类似, 只是把上式所有状态中权 $\boldsymbol{m}$ 的两个分量交换, 但 $|(0,0)_1\rangle$ 和 $|(0,0)_2\rangle$ 要分别换成 $(|(0,0)_1\rangle + \sqrt{3}|(0,0)_2\rangle)/2$ 和 $(\sqrt{3}|(0,0)_1\rangle - |(0,0)_2\rangle)/2$. 也可按计算共轭表示状态基的办法式 (7.160), 把表示 $(3,0)$ 的状态基展开式作如下变换: 两乘积状态交换次序, 所有权改符号. 例如

$$||(0,3),(0,0)\rangle = \sqrt{1/12}\ \{\ |1,1\rangle\ |\overline{1},\overline{1}\rangle + |\overline{1},2\rangle\ |1,\overline{2}\rangle + |2,\overline{1}\rangle\ |\overline{2},1\rangle + \sqrt{3}\ |\ (0,0)_1\ \rangle\ |\ (0,0)_2\ \rangle + \text{(antisym. terms)}\ \}$$

$(1,1)$ 的最高权态展开式有两个, 分别对乘积状态交换对称和反对称, 以下标 S 和 A 标记. 在降算符作用下得到

$$||(1,1),(1,1)\rangle_S = \sqrt{1/20}\ \{\sqrt{3}\ |1,1\rangle\ |(0,0)_1\rangle + \ |1,1\rangle|(0,0)_2\rangle - \sqrt{6}\ |\overline{1},2\rangle|2,\overline{1}\rangle + \text{(sym. terms)}\ \},$$

$$||(1,1),(\overline{1},2)\rangle_S = F_1\ ||(1,1),(1,1)\rangle_S = \sqrt{1/20}\ \{\ \sqrt{6}\ |1,1\rangle|\overline{2},1\rangle - \sqrt{3}\ |\overline{1},2\rangle|(0,0)_1\rangle + |\overline{1},2\rangle|(0,0)_2\rangle + \text{(sym. terms)}\ \},$$

$$||(1,1),(2,\overline{1})\rangle_S = F_2\ ||(1,1),(1,1)\rangle_S = \sqrt{1/20}\{\sqrt{6}|1,1\rangle|1,\overline{2}\rangle - 2|2,\overline{1}\rangle|(0,0)_2\rangle + \text{(sym. terms)}\},$$

$$||(1,1),(0,0)_1\rangle_S = \sqrt{1/2}\ F_1\ ||(1,1),(2,\overline{1})\rangle_S = \sqrt{1/20}\ \{\ \sqrt{3}\ |1,1\rangle|\overline{1},\overline{1}\rangle + \sqrt{3}\ |\overline{1},2\rangle|1,\overline{2}\rangle - 2\ |(0,0)_1\rangle|(0,0)_2\rangle + \text{(sym. terms)}\},$$

$$||(1,1),(0,0)_2\rangle_S = \sqrt{2/3}\ \left\{\ F_2\ ||(1,1),(\overline{1},2)\rangle_S - \sqrt{1/2}\ ||(1,1),(0,0)_1\rangle_S\right\} = \sqrt{1/20}\ \{\ |1,1\rangle|\overline{1},\overline{1}\rangle - \ |\overline{1},2\rangle|1,\overline{2}\rangle + 2\ |2,\overline{1}\rangle|\overline{2},1\rangle + \text{(sym. terms)} - 2\ |(0,0)_1\rangle|(0,0)_1\rangle + 2\ |\ (0,0)_2\ \rangle|(0,0)_2\rangle\},$$

$$||(1,1),(1,1)\rangle_A = \sqrt{1/12}\ \{\ |1,1\rangle|(0,0)_1\rangle - \sqrt{3}\ |1,1\rangle|(0,0)_2\rangle - \sqrt{2}\ |\overline{1},2\rangle|2,\overline{1}\rangle + \text{(antisym. terms)}\},$$

$$||(1,1),(\overline{1},2)\rangle_A = \sqrt{1/12}\ \{\ \sqrt{2}\ |1,1\rangle\ |\overline{2},1\rangle - \ |\overline{1},2\rangle\ |(0,0)_1\rangle - \sqrt{3}\ |\overline{1},2\rangle\ |(0,0)_2\rangle + \text{(antisym. terms)}\ \},$$

$$||(1,1),(2,\overline{1})\rangle_A = \sqrt{1/6}\ \{-\ |1,1\rangle|1,\overline{2}\rangle + \sqrt{2}\ |2,\overline{1}\rangle|(0,0)_1\rangle + \ \text{(antisym. terms)}\},$$

$$||(1,1),(0,0)_1\rangle_A = \sqrt{1/12}\ \{-\ |1,1\rangle|\bar{1},\bar{1}\rangle -\ |\bar{1},2\rangle|1,\bar{2}\rangle + 2\ |2,\bar{1}\rangle|\bar{2},1\rangle + \text{(antisym. terms)}\ \},$$

$$||(1,1),(0,0)_2\rangle_A = 2^{-1}\ \{\ |1,1\rangle|\bar{1},\bar{1}\rangle -\ |\bar{1},2\rangle|1,\bar{2}\rangle +\ \text{(antisym. terms)}\}$$

其余状态展开式从略.

附录 32　盖尔范德基

盖尔范德 (Gelfand) 提出一种统一的方法, 标记 SU(N) 群不可约表示 $[\lambda]$ 的正交归一的状态基, 称为盖尔范德基. 他规定在出现重权时先按 $\mathcal{A}_1$ 子代数的多重态来区分, 如再有重权, 按 $\mathcal{A}_2$ 子代数的多重态来区分, 依此类推. 在此条件下, 他解析地推导出生成元 (谢瓦莱基) 在盖尔范德基里的表示矩阵元.

盖尔范德基用 $N(N+1)/2$ 个参数 ω_{ab} 描写, $1 \leqslant a \leqslant b \leqslant N$. 这组参数排列成一个倒置的三角形

$$|\omega_{ab}\rangle = \left| \begin{array}{ccccccccc} \omega_{1N} & & \omega_{2N} & \cdots & \omega_{(N-1)N} & & \omega_{NN} \\ & \omega_{1(N-1)} & & \cdots & & \omega_{(N-1)(N-1)} & \\ & & \cdots & \cdots & \cdots & & \\ & & \omega_{12} & & \omega_{22} & & \\ & & & \omega_{11} & & & \end{array} \right) \qquad \text{(A32.1)}$$

对 SU(N) 群不可约表示 $[\lambda]$ 的一个权为 $\boldsymbol{m}$ 的基, 有

$$\begin{aligned} &\omega_{\mu N} = \lambda_\mu\ , \qquad \omega_{NN} = \lambda_N = 0\ , \qquad \omega_{ab} \geqslant \omega_{a(b-1)} \geqslant \omega_{(a+1)b}, \\ &m_\mu = -\sum_{a=1}^{\mu+1} \omega_{a(\mu+1)} + 2\sum_{a=1}^{\mu} \omega_{a\mu} - \sum_{a=1}^{\mu-1} \omega_{a(\mu-1)}\ , \qquad \omega_{a0} = 0, \\ &1 \leqslant a \leqslant b \leqslant N\ , \qquad 1 \leqslant \mu \leqslant (N-1) \end{aligned} \qquad \text{(A32.2)}$$

生成元谢瓦莱基的矩阵形式解析表达式为

$$\begin{aligned} &H_\mu\ |\omega_{ab}\rangle = m_\mu\ |\omega_{ab}\rangle = \left\{-\sum_{c=1}^{\mu+1} \omega_{c(\mu+1)} + 2\sum_{c=1}^{\mu} \omega_{c\mu} - \sum_{c=1}^{\mu-1} \omega_{c(\mu-1)}\right\}\ |\omega_{ab}\rangle, \\ &E_\mu\ |\omega_{ab}\rangle = \sum_{\nu=1}^{\mu} A_{\nu\mu}(\omega_{ab})\ |\omega_{ab} + \delta_{a\nu}\delta_{b\mu}\rangle, \\ &F_\mu\ |\omega_{ab}\rangle = \sum_{\nu=1}^{\mu} A_{\nu\mu}(\omega_{ab} - \delta_{a\nu}\delta_{b\mu})\ |\omega_{ab} - \delta_{a\nu}\delta_{b\mu}\rangle, \\ &A_{\nu\mu}(\omega_{ab}) = \left\{-\prod_{\tau=1}^{\mu-1} \left(\omega_{\tau(\mu-1)} - \omega_{\nu\mu} - \tau + \nu - 1\right)\right\}^{1/2} \end{aligned}$$

$$\times\left\{\frac{\prod\limits_{\rho=1}^{\mu+1}\left(\omega_{\rho(\mu+1)}-\omega_{\nu\mu}-\rho+\nu\right)}{\prod\limits_{\lambda\neq\nu,\lambda=1}^{\mu}\left(\omega_{\lambda\mu}-\omega_{\nu\mu}-\lambda+\nu\right)\left(\omega_{\lambda\mu}-\omega_{\nu\mu}-\lambda+\nu-1\right)}\right\}^{1/2} \tag{A32.3}$$

用文字表述：H_μ 的本征值等于盖尔范德基中倒数第 μ 行的参数之和的两倍减去倒数第 $\mu-1$ 行和第 $\mu+1$ 行的参数之和. E_μ (F_μ) 作用在盖尔范德基上得到基的线性组合, 新基的参数是把原基中倒数第 μ 行的某一个参数, 在满足式 (A32.2) 的条件下, 增加 (减少)1.

作为例子, 下面列出 SU(3) 群不可约表示 $[2,1]$ 的盖尔范德基所对应的权和正则张量杨表

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}=|1,1\rangle=\left|\begin{array}{ccccc}2&&1&&0\\&2&&1&\\&&2&&\end{array}\right\rangle,\qquad \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}=|\overline{1},2\rangle=\left|\begin{array}{ccccc}2&&1&&0\\&2&&1&\\&&1&&\end{array}\right\rangle,$$

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}=|2,\overline{1}\rangle=\left|\begin{array}{ccccc}2&&1&&0\\&2&&0&\\&&2&&\end{array}\right\rangle,\qquad \begin{array}{|c|c|}\hline 2&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}=|\overline{2},1\rangle=\left|\begin{array}{ccccc}2&&1&&0\\&2&&0&\\&&0&&\end{array}\right\rangle,$$

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}=|1,\overline{2}\rangle=\left|\begin{array}{ccccc}2&&1&&0\\&1&&0&\\&&1&&\end{array}\right\rangle,\qquad \begin{array}{|c|c|}\hline 2&3\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}=|\overline{1},\overline{1}\rangle=\left|\begin{array}{ccccc}2&&1&&0\\&1&&0&\\&&0&&\end{array}\right\rangle,$$

$$\sqrt{2}\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}-\sqrt{1/2}\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}=|(0,0)_1\rangle=\left|\begin{array}{ccccc}2&&1&&0\\&2&&0&\\&&1&&\end{array}\right\rangle,$$

$$\sqrt{3/2}\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}=|(0,0)_2\rangle=\left|\begin{array}{ccccc}2&&1&&0\\&1&&1&\\&&1&&\end{array}\right\rangle \tag{A32.4}$$

计算 E_2 对态 $|1,\overline{2}\rangle$ 的作用

$$E_2\left|\begin{array}{ccccc}2&&1&&0\\&1&&0&\\&&1&&\end{array}\right\rangle=A_{12}\left|\begin{array}{ccccc}2&&1&&0\\&2&&0&\\&&1&&\end{array}\right\rangle+A_{22}\left|\begin{array}{ccccc}2&&1&&0\\&1&&1&\\&&1&&\end{array}\right\rangle,$$

$$A_{12}=\left\{\frac{-(-1)(1)(-1)(-3)}{(-2)(-3)}\right\}^{1/2}=\sqrt{1/2},$$

$$A_{22}=\left\{\frac{-(1)(3)(1)(-1)}{(2)(1)}\right\}^{1/2}=\sqrt{3/2}$$

附录 33　SU(N) 群协变和逆变张量基的互相转化

8.3 节第三小节已经证明了完全反对称的协变张量基和逆变张量基的互相转化公式 (8.59) 和 (8.62). 现在要把它们推广到一般形式式 (8.63). 分几步证明. 第一步把式 (8.59) 中完全反对称的张量基 $\mathcal{Y}^{[1^m]}\Theta^{b_1\cdots b_m}$ 推广到包含有协变指标的无迹张量基情况. 设 $\boldsymbol{\Omega}_{c\cdots}^{b_1\cdots b_m}$ 是对应表示 $[\lambda]\backslash[1^m]^*$ 的无迹张量基, 其中逆变张量指标 b_j 完全反对称, 协变张量部分是对应杨图 $[\lambda]$ 的正则张量杨表, 杨图 $[\lambda]$ 的行数不大于 $N-m$, c 是任意一个协变指标, 它与每一个逆变指标 b_j 之间都是无迹的

$$\boldsymbol{\Omega}_{c\cdots}^{b_1\cdots b_j\cdots b_k\cdots b_m}=-\boldsymbol{\Omega}_{c\cdots}^{b_1\cdots b_k\cdots b_j\cdots b_m} \tag{A33.1}$$

$$\sum_{c=1}^{N}\sum_{b_j=1}^{N}\delta_{cb_j}\boldsymbol{\Omega}_{c\cdots}^{b_1\cdots b_j\cdots b_m}=0 \tag{A33.2}$$

类似式 (8.59), 用乘完全反对称张量并把 m 对指标收缩的办法, 可把逆变张量变成协变张量, 属表示 $[1^{N-m}]$

$$\boldsymbol{\Phi}_{a_1\cdots a_{N-m}c\cdots}=\frac{1}{m!}\sum_{b_1\cdots b_m}\epsilon_{a_1\cdots a_{N-m}b_1\cdots b_m}\boldsymbol{\Omega}_{c\cdots}^{b_1\cdots b_m} \tag{A33.3}$$

与式 (8.59) 不同之处在于 $\boldsymbol{\Omega}$ 原来就有协变张量指标, 对应表示 $[\lambda]$. 现在两部分协变张量要直乘, 直乘后的表示应该按式 (8.49) 用立特武德 - 理查森规则计算. 我们要证明, 原张量基 $\boldsymbol{\Omega}_{c\cdots}^{b_1\cdots b_m}$ 的无迹条件 (A33.2) 会使直乘表示 $[1^{N-m}]\times[\lambda]$ 的分解中只保留把两表示直接粘在一起的一项 $[\lambda']$

$$\lambda_k'=\lambda_k+1,\qquad 1\leqslant k\leqslant N-m \tag{A33.4}$$

而按立特武德 - 理查森规则计算的其他项都对应零空间. 就是说, 要证明至少把一个协变指标 c 与新产生的协变指标 a_j 全反对称化的项都是零

$$\begin{aligned}&\sum_{a_1\cdots a_{N-m}c}\epsilon^{a_1\cdots a_{N-m}d_1\cdots d_{m-1}c}\boldsymbol{\Phi}_{a_1\cdots a_{N-m}c\cdots}\\&=\frac{1}{m!}\sum_{a_1\cdots a_{N-m}cb_1\cdots b_m}\epsilon^{a_1\cdots a_{N-m}d_1\cdots d_{m-1}c}\epsilon_{a_1\cdots a_{N-m}b_1\cdots b_m}\boldsymbol{\Omega}_{c\cdots}^{b_1\cdots b_m}=0\end{aligned} \tag{A33.5}$$

因为按式 (1.14)

$$\sum_{a_1\cdots a_{N-m}}\epsilon^{a_1\cdots a_{N-m}d_1\cdots d_{m-1}c}\epsilon_{a_1\cdots a_{N-m}b_1\cdots b_m}$$

等于 $m!$ 项之和, 每项都是 m 个 δ 函数的乘积, 其中分别有一个因子 δ_{cb_j}. 由于式 (A33.2), 它代入式 (A33.5) 得零. 这样, 我们证明了下面两表示等价

$$[\lambda]\backslash[1^m]^* \simeq [\lambda'] \tag{A33.6}$$

杨图 $[\lambda']$ 是 $N-m$ 行的, 去掉第一列得杨图 $[\lambda]$. 类似地有 $[1^m]\backslash[\lambda]^* \simeq [\lambda']^*$. 换一下符号, 得

$$[\tau]^* \simeq [1^{N-m}]\backslash[\tau']^*, \qquad \tau'_k = \tau_k - 1, \qquad 1 \leqslant k \leqslant m \tag{A33.7}$$

其中, 杨图 $[\tau]$ 的行数为 m, 去掉第一列后得杨图 $[\tau']$. 对应式 (A33.7) 的张量基转换为

$$\mathbf{\Phi}^{c\cdots}_{a_1\cdots a_{N-m}} = \frac{1}{m!}\sum_{b_1\cdots b_m} \epsilon_{a_1\cdots a_{N-m}b_1\cdots b_m}\mathcal{Y}^{[\tau]}\mathbf{\Theta}^{b_1\cdots b_m c\cdots} \tag{A33.8}$$

其中, 不可约张量基 $\mathcal{Y}^{[\tau]}\mathbf{\Theta}^{b_1\cdots b_m c\cdots}$ 的正则张量杨表形如

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline b_1 & & \\ \hline b_2 & c & \\ \cline{1-3} & \vdots & \\ \vdots & & \\ \cline{2-2} & & \\ \hline b_m & & \\ \hline \end{array} \tag{A33.9}$$

根据福克条件式 (6.69), 正则张量杨表满足

$$\mathcal{Y}^{[\tau]}\mathbf{\Theta}^{b_1\cdots b_m c\cdots} - \sum_{j=1}^{m} \mathcal{Y}^{[\tau]}\mathbf{\Theta}^{b_1\cdots b_{j-1}cb_{j+1}\cdots b_m b_j\cdots} = 0 \tag{A33.10}$$

条件式 (A33.10) 保证了张量基 $\mathbf{\Phi}^{c\cdots}_{a_1\cdots a_{N-m}}$ 是无迹的. 事实上

$$\sum_{c=1}^{N} \mathbf{\Phi}^{c\cdots}_{a_1\cdots a_{i-1}ca_{i+1}\cdots a_{N-m}} = \frac{1}{m!}\sum_{cb_1\cdots b_m} \epsilon_{a_1\cdots a_{i-1}ca_{i+1}\cdots a_{N-m}b_1\cdots b_m}\mathcal{Y}^{[\tau]}\mathbf{\Theta}^{b_1\cdots b_m c\cdots} \tag{A33.11}$$

等式右面 c 和 m 个 b_j 都是求和指标, 而且作为反对称张量 ϵ 的下标它们是反对称的. 把求和指标 c 和 b_j 交换, 再在 ϵ 中把它们换回来, 其效果只是把后面的张量基做如下替换

$$\mathcal{Y}^{[\tau]}\mathbf{\Theta}^{b_1\cdots b_m c\cdots} \longrightarrow -\mathcal{Y}^{[\tau]}\mathbf{\Theta}^{b_1\cdots b_{j-1}cb_{j+1}\cdots b_m b_j\cdots}$$

这替换正是把式 (A33.10) 的第一项换成后面求和式中的任何一项. 因此, 可把式 (A33.11) 左边的张量基 $\mathcal{Y}^{[\tau]}\mathbf{\Theta}^{b_1\cdots b_m c\cdots}$ 换成式 (A33.10) 的右边并除以 $m+1$, 而由

式 (A33.10) 知它为零

$$\sum_{c=1}^{N} \Phi^{c\cdots}_{a_1\cdots a_{i-1}ca_{i+1}\cdots a_{N-m}} = \frac{1}{(m+1)!}\sum_{cb_1\cdots b_m} \epsilon_{a_1\cdots a_{i-1}ca_{i+1}\cdots a_{N-m}b_1\cdots b_m} \times \left\{ \mathcal{Y}^{[\tau]}\Theta^{b_1\cdots b_m c\cdots} - \sum_{j=1}^{m} \mathcal{Y}^{[\tau]}\Theta^{b_1\cdots b_{j-1}cb_{j+1}\cdots b_m b_j\cdots} \right\} = 0 \tag{A33.12}$$

最后, 证明最一般的情况式 (8.63). 设 $\Omega_{d\cdots}^{b_1\cdots b_m c\cdots}$ 是对应表示 $[\lambda]\backslash[\tau]^*$ 的无迹张量基, 其中逆变张量部分对应类似式 (A33.9) 的正则张量杨表, 协变张量部分是对应杨图 $[\lambda]$ 的正则张量杨表, 杨图 $[\tau]^*$ 的行数为 m, 杨图 $[\lambda]$ 的行数不大于 $N-m$, d 是任意一个协变指标, 它与每一个逆变指标 b_j 或 c 之间都是无迹的. 当用完全反对称张量把对应逆变张量部分的正则张量杨表第一列变为协变指标时

$$\Phi^{c\cdots}_{a_1\cdots a_{N-m}d\cdots} = \frac{1}{m!}\sum_{b_1\cdots b_m} \epsilon_{a_1\cdots a_{N-m}b_1\cdots b_m}\Omega_{d\cdots}^{b_1\cdots b_m c\cdots} \tag{A33.13}$$

Φ 的协变张量部分对应两个杨图的外积

$$[1^{N-m}]\times[\lambda]$$

在克莱布施－戈登级数中, 除了把两个杨图粘起来的项 $[\lambda']$ 外, 其他项都至少有一个原来的协变指标 (例如 d) 和所有新的协变指标 a_j 完全反对称化. 把这些指标反对称化, 相当于式 (A33.13) 乘反对称张量

$$\epsilon^{a_1\cdots a_{N-m}b'_1\cdots b'_{m-1}d}$$

并对 d 和所有 a_i 求和, 这样就会产生 m 个 δ 函数的乘积项之和, 每一项中都含有一个因子 δ_{db_j}. 既然指标 d 和所有 b_j 都无迹, 这样的项为零. 现在新张量基 $\Phi^{c\cdots}_{a_1\cdots a_{N-m}d\cdots}$ 的逆变张量部分对应正则张量杨表 $[\tau']$, 协变张量部分对应正则张量杨表 $[\lambda']$, c 和 d 之间本来就无迹, c 和新协变指标 a_i 之间已由式 (A33.12) 证明为无迹, 因而新张量基属不可约表示 $[\lambda']\backslash[\tau']$. 证完.

附录 34 SU(3) 群不可约表示的具体形式

第七章开始讨论的李群和李代数不可约表示, 实际只讨论了生成元的表示矩阵. 在大多数物理问题中, 知道生成元的表示矩阵已经够了. 如果特殊问题确有需要, 群元素的表示矩阵也是可以计算的. 例如, 对 SU(N) 群, 用杨算符投影的方法把张量空间分解为不可约张量子空间, 正则张量杨表是张量子空间的基. 当用杨算符把正

则张量杨表具体展开成张量基 $\boldsymbol{\Theta}_{a_1\cdots a_n}$ 的组合时, 这组合系数构成的矩阵 X, 正是把 SU(N) 群自身表示的直乘形式约化为不可约表示直和的相似变换矩阵

$$X\left(u\times u\times\cdots\times u\right)X^{-1}=\bigoplus_{[\lambda]}d_{[\lambda]}D^{[\lambda]}(u) \tag{A34.1}$$

其中, 杨图 $[\lambda]$ 的格数为 n, $d_{[\lambda]}$ 是置换群表示 $[\lambda]$ 的维数. 采用这种方法一般需要借用计算机.

物理上更常用的方法是利用外尔互反性, 直接采用直乘表示的形式. 用杨算符投影得到的张量基, 指标之间具有确定的对称性质, 而且这种对称性质在 SU(N) 变换中保持不变. 因此正则张量杨表在 SU(N) 变换中仍可按 SU(N) 群自身表示的直乘来变换, 例如

$$O_u\ \begin{array}{|c|c|}\hline a & b \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array}=\sum_{a'b'c'}\ \begin{array}{|c|c|}\hline a' & b' \\ \hline c' \\ \cline{1-1}\end{array}\ u_{a'a}u_{b'b}u_{c'c} \tag{A34.2}$$

等式右面出现的非正则的张量杨表, 可以表为正则张量杨表的线性组合, 从而得到正则张量杨表的变换矩阵.

也可采用更直接的方法. 把李群的群元素分解成若干个单参数子李群元素的乘积, 这种分解的方法, 本质上就是在 SO(3) 群中根据群元素的矩阵形式确定欧拉角的方法的推广. 这些子李群的生成元取为 H_μ 或 $-\mathrm{i}(E_\mu-F_\mu)/2$. 它们在 $\mathcal{A}_\mu$ 多重态中的表示矩阵类似 SU(2) 群的 $2I_3$ 或 I_2, 因而单参数子李群元素在 $\mathcal{A}_\mu$ 多重态中的表示矩阵是对角矩阵或 d^j 矩阵. 在用方块权图方法计算李群不可约表示生成元的矩阵形式时, 已经得到状态基和子代数 $\mathcal{A}_\mu$ 多重态的基之间的组合关系, 这种组合关系就是相似变换关系. 根据这相似变换关系可以计算单参数子李群元素在李群不可约表示中的表示矩阵.

先复习一下 SO(3) 群中, 根据元素 R 在自身表示中的矩阵形式确定欧拉角的方法. R 矩阵的第三列, 作为列矩阵, 描写三维空间的单位矢量 $\hat{\boldsymbol{n}}$. 设它的极角是 β, 方位角是 α, 则转动 $S(\alpha,\beta)$ 把 x_3 轴转到 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向. 因此, $S(\alpha,\beta)^{-1}R$ 是绕 x_3 轴的转动变换, 记作 $R(\vec{e}_3,\gamma)$

$$R=S(\alpha,\beta)R(\vec{e}_3,\gamma)=R(\vec{e}_3,\alpha)R(\vec{e}_2,\beta)R(\vec{e}_3,\gamma)$$

这方法的关键是, R 矩阵第三列是三维空间的单位矢量 $\hat{\boldsymbol{n}}$, 找转动 $S(\alpha,\beta)^{-1}$, 把 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向转到 x_3 轴方向去, 从而把 SO(3) 转动 R 简化为 SO(2) 转动. 推广到 SU(N) 群, 群元素 u 的第 N 列是 N 维复空间的单位矢量, 可用 $u^{-1}\in$SU(N) 变换把上述方向转到 N 维复空间的第 N 个正方向, 即变成的矢量只有第 N 个分量为 1, 其余分量都为 0. 从而把 SU(N) 变换简化为 SU($N-1$) 变换. u 变换有 $2N-1$ 个参数, 正好是 SU(N) 群和 SU($N-1$) 群的参数之差

$$\left\{N^2-1\right\}-\left\{(N-1)^2-1\right\}=2N-1$$

下面我们以 SU(3) 群为例, 具体说明这一方法.

SU(3) 群有八个生成元, 我们更关心其中四个生成元, 把它们表成谢瓦莱基的组合

$$
\begin{aligned}
&2T_3 = H_1 \ , && \left\{\sqrt{3}T_8 - T_3\right\} = H_2, \\
&T_2 = (2\mathrm{i})^{-1}\left(E_1 - F_1\right) \ , && T_7 = (2\mathrm{i})^{-1}\left(E_2 - F_2\right)
\end{aligned} \tag{A34.3}
$$

它们生成的单参数子李群的元素, 在自身表示中取如下形式

$$
R_1(\varphi) \equiv \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi H_1} = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} & 0 & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad R_2(\varphi) \equiv \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi H_2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} & 0 \\ 0 & 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} \end{pmatrix},
$$

$$
S_1(\theta) \equiv \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta T_2} = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) & 0 \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},
$$

$$
S_2(\theta) \equiv \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta T_7} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ 0 & \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}
$$

现把 SU(3) 群任意元素 u 的第三列矩阵元素表成如下形式

$$
\begin{pmatrix} u_{13} \\ u_{23} \\ u_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_1 s_2 r_1^{-1} r_2^{-1} r_3 \\ -c_1 s_2 r_1 r_2^{-1} r_3 \\ c_2 r_2 r_3 \end{pmatrix} = R_1(\varphi_1) S_1(\theta_1) R_2(\varphi_2) S_2(\theta_2) R_2(\varphi_3) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}
$$

其中, $c_i = \cos(\theta_i/2)$, $s_i = \sin(\theta_i/2)$ 和 $r_i = \exp(\mathrm{i}\varphi_i)$. 提出这五个变换后, u 化为 SU(2) 变换, 它的第二列又可表为

$$
\begin{pmatrix} u'_{12} \\ u'_{22} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -s_3 r_4^{-1} r_5 \\ c_3 r_4 r_5 \\ 0 \end{pmatrix} = R_1(\varphi_4) S_1(\theta_3) R_1(\varphi_5) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}
$$

因此

$$
\begin{aligned}
u &= R_1(\varphi_1) S_1(\theta_1) R_2(\varphi_2) S_2(\theta_2) R_2(\varphi_3) R_1(\varphi_4) S_1(\theta_3) R_1(\varphi_5) \\
&= \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & s_1 s_2 r_1^{-1} r_2^{-1} r_3 \\ u_{21} & u_{22} & -c_1 s_2 r_1 r_2^{-1} r_3 \\ s_2 s_3 r_2 r_3^{-1} r_4 r_5^{-1}, & s_2 c_3 r_2 r_3^{-1} r_4 r_5 & c_2 r_2 r_3 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{A34.4}
$$

$$u_{11}=\left(c_1c_3r_4^{-1}-s_1c_2s_3r_2^{-1}r_3^{-1}r_4\right)r_1^{-1}r_5^{-1},$$
$$u_{12}=\left(-c_1s_3r_4^{-1}-s_1c_2c_3r_2^{-1}r_3^{-1}r_4\right)r_1^{-1}r_5,$$
$$u_{21}=\left(s_1c_3r_4^{-1}+c_1c_2s_3r_2^{-1}r_3^{-1}r_4\right)r_1r_5^{-1},$$
$$u_{22}=\left(-s_1s_3r_4^{-1}+c_1c_2c_3r_2^{-1}r_3^{-1}r_4\right)r_1r_5$$

根据第三列矩阵元素定出 θ_1, θ_2, φ_1, φ_2 和 φ_3, 再根据第三行矩阵元素定出 θ_3, φ_4 和 φ_5. 具体说, 设 u_{ab} 的模和幅角分别为 ρ_{ab} 和 Φ_{ab}, 则

$$\begin{aligned}
&\cos(\theta_1/2)=\rho_{23}/\sin(\theta_2/2)\ , && \cos(\theta_2/2)=\rho_{33},\\
&\cos(\theta_3/2)=\rho_{32}/\sin(\theta_2/2)\ , && 0\leqslant\theta_j\leqslant\pi,\\
&\varphi_2=(-\Phi_{13}-\Phi_{23}+2\Phi_{33}+\pi)/4\ , && \varphi_1=(-\Phi_{13}+\Phi_{23}-\pi)/2,\\
&\varphi_3=(\Phi_{13}+\Phi_{23}+2\Phi_{33}-\pi)/4\ , && \varphi_5=(\Phi_{32}-\Phi_{31})/2,\\
&\varphi_4=(\Phi_{32}+\Phi_{31})/2-\varphi_2+\varphi_3\ , && -\pi\leqslant\varphi_j\leqslant\pi
\end{aligned}$$

SU(N) 群的群元素共轭于取对角矩阵的群元素. 对 SU(3) 群, 取对角矩阵的群元素可用参数 φ_3 和 φ_5 描写, 其余参数取为零

$$\begin{aligned}
&u=\mathrm{diag}\left\{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_3},\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\varphi_3-\varphi_5)},\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_5}\right\},\\
&-\pi\leqslant\varphi_3\leqslant\pi\ , \qquad -\pi\leqslant\varphi_5\leqslant\pi\\
&\theta_1=\theta_2=\theta_3=0, \qquad \varphi_1=\varphi_2=\varphi_4=0
\end{aligned}$$

参数 φ_3 和 φ_5 描写 SU(3) 群的类.

在用方块权图方法计算得的正交归一基中计算 $R_k(\varphi)$ 的表示矩阵比较简单, 只要把 H_k 的本征值乘上 $-\mathrm{i}\varphi$, 放到指数上即可. $S_k(\theta)$ 的表示矩阵, 可根据子李代数 $\mathcal{A}_k$ 的多重态, 取相应的 SU(2) 表示矩阵 $d^j(\theta)$ 的形式, 其中 $2j+1$ 等于该多重态的重数 m_k+1. 例如, 在 SU(3) 群表示 [3] 中, 把正交基编号

$$\begin{aligned}
&1:\ (3,0),\quad 2:\ (1,1),\quad 3:\ (\overline{1},2),\quad 4:\ (\overline{3},3),\quad 5:\ (2,\overline{1}),\\
&6:\ (0,0),\quad 7:\ (\overline{2},1),\quad 8:\ (1,\overline{2}),\quad 9:\ (\overline{1},\overline{1}),\quad 10:\ (0,\overline{3})
\end{aligned}\tag{A34.5}$$

这四个子群元素取如下形式

$$\begin{aligned}
&D^{[3]}[R_1(\varphi)]=\mathrm{diag}\left\{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}3\varphi},\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi},\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi},\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}3\varphi},\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\varphi},\ 1,\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\varphi},\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi},\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi},\ 1\right\},\\
&D^{[3]}[R_2(\varphi)]=\mathrm{diag}\left\{1,\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi},\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\varphi},\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}3\varphi},\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi},\ 1,\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi},\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\varphi},\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi},\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}3\varphi}\right\},\\
&D^{[3]}[S_1(\theta)]=d^{3/2}(\theta)\oplus d^1(\theta)\oplus d^{1/2}(\theta)\oplus 1
\end{aligned}\tag{A34.6}$$

$D^{[3]}(S_1(\theta))$ 是四个子矩阵的直和, $d^{3/2}(\theta)$ 涉及的行 (列) 是 1, 2, 3 和 4, $d^1(\theta)$ 涉及的行 (列) 是 5, 6 和 7, $d^{1/2}(\theta)$ 涉及的行 (列) 是 8 和 9, $d^0(\theta)=1$ 涉及第 10 行 (列). $D^{[3]}(S_2(\theta))$ 和 $D^{[3]}(S_1(\theta))$ 类似, 也是这样四个子矩阵的直和, 只是 $d^{3/2}(\theta)$ 涉及的行 (列) 是 4, 7, 9 和 10, $d^1(\theta)$ 涉及的行 (列) 是 3, 6, 和 8, $d^{1/2}(\theta)$ 涉及的行 (列) 是 2 和 5, $d^0(\theta)=1$ 涉及第 1 行 (列).

再例如, 在 SU(3) 群伴随表示 [2,1] 中, 正交基作如下编号

$$\begin{array}{llll} 1:\ (1,1), & 2:\ (\overline{1},2), & 3:\ (2,\overline{1}), & 4:\ (0,0)_1, \\ 5:\ (\overline{2},1), & 6:\ (0,0)_2, & 7:\ (1,\overline{2}), & 8:\ (\overline{1},\overline{1}) \end{array} \tag{A34.7}$$

这四个子群元素取如下形式

$$\begin{aligned} &D^{[2,1]}(R_1(\varphi)) = \text{diag}\left\{e^{-i\varphi},\ e^{i\varphi},\ e^{-i2\varphi},\ 1,\ e^{i2\varphi},\ 1,\ e^{-i\varphi},\ e^{i\varphi}\right\}, \\ &D^{[2,1]}(R_2(\varphi)) = \text{diag}\left\{e^{-i\varphi},\ e^{-i2\varphi},\ e^{i\varphi},\ 1,\ e^{-i\varphi},\ 1,\ e^{i2\varphi},\ e^{i\varphi}\right\}, \\ &D^{[2,1]}(S_1(\theta)) = d^{1/2}(\theta) \oplus d^1(\theta) \oplus 1 \oplus d^{1/2}(\theta) \end{aligned} \tag{A34.8}$$

$D^{[2,1]}(S_1(\theta))$ 是四个子矩阵的直和, 一个 $d^{1/2}(\theta)$ 涉及的行 (列) 是 1 和 2, 另一个 $d^{1/2}(\theta)$ 涉及的行 (列) 是 7 和 8, $d^1(\theta)$ 涉及的行 (列) 是 3, 4 和 5, $d^0(\theta)=1$ 涉及第 6 行 (列). $D^{[2,1]}(S_2(\theta))$ 的第 1 和第 3 行 (列) 子矩阵是 $d^{1/2}(\theta)$, 第 5 和第 8 行 (列) 子矩阵也是 $d^{1/2}(\theta)$, 第 2, 第 4, 第 6 和第 7 行 (列) 子矩阵取如下形式

$$X\begin{pmatrix} d^1(\theta) & \\ & 1 \end{pmatrix}X^{-1}, \qquad X=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{A34.9}$$

附录 35　SU(NM) 群的分导表示

在微观领域里, 由于实验条件的限制以及问题本身的复杂性, 人们对微观粒子的认识还是很不充分的, 因而在微观领域, 对称性的研究就显得更为重要. 对微观系统各种对称性的认识常常会帮助我们理解微观领域已发现的物理现象, 认识微观领域的物理规律, 进一步探索新的物理现象. 这种对称性包括严格成立的对称性, 在一定条件下成立的对称性和只在一定精度下近似成立的对称性. 这类近似对称性的寻找和提出, 需要有丰富的想像力, 在理论提出之初, 不必苛求它的“合理性”, 重要的是它应该解释某些物理现象. 理论和模型能否保留下来, 最终是由实验来判决的. 想像这类新的对称性的思路之一, 就是设想目前已知的对称性是某种更大对称性的一种表现, 然后研究这种更大对称性能否提供新的物理信息, 并得到实验证实.

附录 35 和附录 36 讨论的两个例子都是历史上提出过的理论模型, 目前还在一定条件下应用, 或正在变着样子作进一步探索. 我们的重点不在物理模型本身, 而在于从中提炼出新的群论方法, 也许它会在别的物理领域, 对新的物理问题有所启发.

20 世纪 60 年代, 有人试图把味道 SU(3) 群和自旋 SU(2) 群结合起来, 由 SU(3)⊗SU(2) 群扩充为 SU(6) 群, 设想这种内部空间和外部时空联系在一起的 SU(6) 群是微观系统在一定条件下的一种近似对称性. 从数学上说, 这是大群 SU(NM) 与其子群 SU(N)⊗SU(M) 的关系问题. 先在自身表示中研究大群与子群的关系. 一个 N 维幺模幺正矩阵 u 和一个 M 维幺模幺正矩阵 v 的直乘, 是一个 NM 维幺模幺正矩阵, 所有这样矩阵的集合构成群 SU(N)⊗SU(M), 是 SU(NM) 群的子群. 任意 NM 维幺正矩阵不一定可表为一个 N 维幺正矩阵和一个 M 维幺正矩阵的直乘. 从群参数数目来看, SU(NM) 群有 $(NM)^2-1$ 个参数, 而子群 SU(N)⊗SU(M) 只有

$$(N^2-1)+(M^2-1)=(NM)^2-1-(N^2-1)(M^2-1) \tag{A35.1}$$

个参数. 子群的生成元一般表为

$$\boldsymbol{I_A}\times\mathbf{1}_M\ ,\qquad \text{和}\qquad \mathbf{1}_N\times\boldsymbol{I_B}$$

除了这些生成元外, 大群还有如下 $(N^2-1)(M^2-1)$ 个生成元

$$I_A\times I_B$$

把 SU(NM) 群的矢量指标 α 分解为两个指标 (a,i), $1\leqslant a\leqslant N$, $1\leqslant i\leqslant M$, 则 α 有 NM 个不同的取值

$$\alpha=(a,i)=11,\ 12,\ \cdots,\ 1M,\ 21,\ 21,\ \cdots,\ 2M,\ \cdots,\ N1,\ N1,\ \cdots,\ NM$$

a 是 SU(N) 群的矢量指标, i 是 SU(M) 群的矢量指标, 矢量 $\boldsymbol{T}_{ai}$ 在子群 SU(N)⊗SU(M) 的变换中按下式变换

$$\boldsymbol{T}_{ai}\ \xrightarrow{u\times v}\ \sum_{bj}\ (u\times v)_{ai,bj}\,\boldsymbol{T}_{bj}=\sum_{bj}\ u_{ab}v_{ij}\boldsymbol{T}_{bj} \tag{A35.2}$$

在 SU(NM) 群的变换下, 矢量 T_{ai} 做更一般的变换

$$\boldsymbol{T}_{ai}\ \xrightarrow{U}\ \sum_{bj}\ U_{ai,bj}\boldsymbol{T}_{bj} \tag{A35.3}$$

对 SU(NM) 群的 n 阶张量, 用杨算符投影后得到用杨图 $[\omega]$ 标记的张量子空间, 对应表示 $[\omega]$. 现在要讨论它关于子群 SU(N)⊗SU(M) 的分导表示, 如何按子群不可约表示 $[\lambda]\times[\mu]$ 分解. 设在 $[\omega]$ 分导表示的约化中含子群不可约表示 $[\lambda]\times[\mu]$,

三个杨图都是 n 格杨图, 则在以 $[\omega]$ 标记的张量空间中存在这样的张量子空间, 在此子空间中的张量, 指标间都具有如下特定的置换对称性. 这 n 个指标的每一个都分为两部分, 把 i 部分固定, a 部分具有以 $[\lambda]$ 标记的置换对称性, 把 a 部分固定, i 部分具有以 $[\mu]$ 标记的置换对称性, 两部分都变, 具有以 $[\omega]$ 标记的置换对称性. 因此置换群表示 $[\omega]$ 必须在置换群表示 $[\lambda]$ 和 $[\mu]$ 的直乘 (内积) 约化中出现

$$[\lambda] \times [\mu] = [\omega] \oplus \cdots$$

这条件也是 SU(NM) 群的不可约表示 $[\omega]$, 作为 SU(N)⊗SU(M) 子群的分导表示, 在按子群不可约表示分解时, 子群表示 $[\lambda] \times [\mu]$ 出现的条件. 除了这一条件外, 作为幺正矩阵群的表示, 杨图 $[\omega]$ 的行数不能超过 NM, 杨图 $[\lambda]$ 的行数不能超过 N, 杨图 $[\mu]$ 的行数不能超过 M.

现在以 SU(6) 群不可约表示, 作为 SU(3)⊗SU(2) 子群的分导表示, 按子群不可约表示分解为例来说明这一计算方法, 其中 SU(3) 群的表示描写味道多重态, SU(2) 群的表示描写自旋多重态. 这些表示都用多重态的重数来标记

$$6 \simeq (3,\ 2)$$

$$15 \simeq (3^*,\ 3) \oplus (6,\ 1)$$

$$21 \simeq (3^*,\ 1) \oplus (6,\ 3)$$

$$56 \simeq (10,\ 4) \oplus (8,\ 2)$$

$70 \simeq (10, 2) \oplus (8, 4) \oplus (8, 2) \oplus (1, 2)$

$20 \simeq (1, 4) \oplus (8, 2)$

$35 \simeq (1, 3) \oplus (8, 1) \oplus (8, 3)$

我们特别关心表示 [3] 和表示 $[2,1^4] \simeq [1]\backslash[1]^*$ 的约化. 前者给出低能重子可能的多重态, 即自旋 3/2 的十重态和自旋 1/2 的八重态, 而且因为它们处在同一个 SU(6) 多重态中, 所以宇称相同. 后者给出低能介子可能的多重态, 即自旋 1 的单态, 自旋 0 的八重态和自旋 1 的八重态, 它们的宇称相同. 这正好与 20 世纪 60 年代初实验上已发现的强子相吻合. 现在发现的强子太多了, SU(6) 理论已不能做出很好的解释. 此外, 在 SU(6) 理论中, 用 SU(2) 群来描写自旋, 决定了这理论只能是非相对论的, 很难解释高能粒子物理的许多现象.

附录 36　SU($N+M$) 群的分导表示

20 世纪 70 年代初, 描写强相互作用的颜色 SU(3) 规范理论和描写弱电统一作用的 SU(2)⊗U(1) 规范理论都取得了重大的进展, 这些理论至今仍是粒子物理中的最基本的理论模型, 常称为标准模型. 1974 年乔治 (Georgi) 和格拉肖 (Glashow) 把两个规范理论纳入更大的 SU(5) 规范理论中去, 从而试图把粒子物理中最基本的三种相互作用, 即强相互作用, 电磁相互作用和弱相互作用统一到一个规范理论模型中, 把重子和轻子放在同一个规范群的多重态中, 称为 SU(5) 大统一模型. 这理论如

能成功, 前景当然十分诱人. 正因为这模型把重子和轻子放在同一个多重态中, 它就必须预言重子衰变到轻子的概率, 以解释为什么实验中从未观测到这类衰变现象. 如果存在这类衰变, 质子的存在就有一定的寿命, 遗憾的是这模型预言的质子寿命, 低于实验中检测到的质子寿命的下限几个数量级, 从而遭到实验的否定. 目前还有人对这理论做各种修正, 特别是引入超对称理论, 使这理论还有一定的吸引力, 但它已退出粒子物理界关心的热点.

从数学上说, 这是大群 SU$(N+M)$ 的不可约表示 $[\omega]$ 关于子群 SU$(N)\otimes$SU(M) 的分导表示, 如何按子群不可约表示 $[\lambda]\times[\mu]$ 分解的问题.

先看 SU$(N+M)$ 群的自身表示. 一个 N 维幺正矩阵 u 和一个 M 维幺正矩阵 v 的直和, 是一个 $N+M$ 维的幺正矩阵. 从群论的角度看, SU(N) 群的元素是 N 维幺正矩阵 u 与 M 维单位矩阵的直和, SU(M) 群的元素是 N 维单位矩阵和 M 维幺正矩阵 v 的直和. 分属这两群的元素乘积可以对易, 所有这样的元素乘积的集合构成群 SU$(N)\otimes$SU(M), 它是 SU$(N+M)$ 群的子群. 从群参数数目来看, SU$(N+M)$ 群有 $(N+M)^2-1$ 个参数, 而子群 SU$(N)\otimes$SU(M) 只有

$$(N^2-1)+(M^2-1)=(N+M)^2-1-(2NM+1) \tag{A36.1}$$

个参数. 这余下的 $2NM$ 个参数描写直和矩阵之外的非对角元, 而最后一个参数描写如下对角矩阵

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Y\varphi}=\begin{pmatrix} \mathbf{1}_N\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/N} & 0 \\ 0 & \mathbf{1}_M\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/M}\end{pmatrix}, \qquad Y=\begin{pmatrix} -\dfrac{\mathbf{1}_N}{N} & 0 \\ 0 & \dfrac{\mathbf{1}_M}{M}\end{pmatrix} \tag{A36.2}$$

这样的对角矩阵的集合构成子群 U(1). 在 SU(5) 大统一模型中, 这生成元 Y 称为弱超荷, 或简称超荷. 当 φ 等于 2π 整数倍时, 这对角矩阵同时属于子群 SU$(N)\otimes$SU(M) 和子群 U(1). 因此, SU$(N+M)$ 群包含子群 SU$(N)\otimes$SU(M) 和子群 U(1), 但不包含群 SU$(N)\otimes$SU$(M)\otimes$U(1).

子群 SU$(N)\otimes$SU(M) 的生成元可表为

$$\begin{pmatrix} I_A & 0 \\ 0 & 0\end{pmatrix}, \qquad 和 \qquad \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I_B\end{pmatrix}$$

除了这些生成元外, 群 SU$(N+M)$ 还有式 (A36.2) 给出的生成元 Y 和如下形式的 $2NM$ 个生成元

$$\begin{pmatrix} 0 & X \\ X^\dagger & 0\end{pmatrix}$$

把 SU$(N+M)$ 群的矢量分量指标 α 的取值分成两部分

$$1\leqslant a\leqslant N\ , \qquad (N+1)\leqslant i\leqslant (N+M)\ , \qquad 1\leqslant \alpha\leqslant (N+M)$$

a 是 SU(N) 群的分量指标, i 是 SU(M) 群的分量指标, 而 α 或者等于 a, 或者等于 i. 在子群 SU$(N)\otimes$SU(M) 的变换中, 当 $\alpha=a$ 时矢量 $\boldsymbol{T}_a$ 按 SU(N) 群变换, 当 $\alpha=i$ 时矢量 $\boldsymbol{T}_i$ 按 SU(M) 群变换, 只有在 SU$(N+M)$ 群的变换下, 两类指标的矢量分量才会相互组合.

对 SU$(N+M)$ 群的 n 阶张量 $\boldsymbol{T}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}$, 用杨图 $[\omega]$ 标记的杨算符 $\mathcal{Y}^{[\omega]}$ 投影后, 得到的张量子空间对应 SU$(N+M)$ 群的不可约表示 $[\omega]$. 现在讨论表示 $[\omega]$ 关于子群 SU$(N)\otimes$SU(M) 的分导表示, 如何按子群不可约表示 $[\lambda]\times[\mu]$ 分解. 任意给出一个张量分量, 设有 n_1 个指标取值在前 N 个数中, 称为 a 类指标, $n_2=n-n_1$ 个指标取值在后 M 个数中, 称为 i 类指标. 用子群的杨算符 $\mathcal{Y}^{[\lambda]}\mathcal{Y}^{[\mu]}$ 投影, 其中杨图 $[\lambda]$ 是 n_1 格的, 杨算符 $\mathcal{Y}^{[\lambda]}$ 作用在 a 类指标上, 杨图 $[\mu]$ 是 n_2 格的, 杨算符 $\mathcal{Y}^{[\mu]}$ 作用在 i 类指标上. 这样得到的张量子空间对应子群不可约表示 $[\lambda]\times[\mu]$. 设

$$\mathcal{Y}^{[\omega]}t\mathcal{Y}^{[\lambda]}\mathcal{Y}^{[\mu]}\boldsymbol{T}_{\alpha_1\cdots\alpha_n}\neq 0\ ,\qquad t\ \text{属}\ \mathrm{S}_{n+m}\ \text{群代数}$$

则在 $\mathcal{Y}^{[\omega]}$ 投影构成的张量空间中, 有属于子群 SU$(N)\otimes$SU(M) 不可约表示 $[\lambda]\times[\mu]$ 的子空间, 即在表示 $[\omega]$ 关于子群的分导表示约化中出现子群表示 $[\lambda]\times[\mu]$. 因此这分导表示的约化, 可用立特武德－理查森规则来计算

$$\begin{aligned}
[\omega] &\simeq \bigoplus a^{\omega}_{\lambda\mu}\ \{[\lambda]\times[\mu]\}\\
d_{[\omega]}[\mathrm{SU}(N+M)] &= \sum a^{\omega}_{\lambda\mu}\ d_{[\lambda]}[\mathrm{SU}(N)]d_{[\mu]}[\mathrm{SU}(M)]
\end{aligned}\tag{A36.3}$$

三个杨图分别描写三个不同的幺正矩阵群的表示, 三个杨图 $[\omega]$, $[\lambda]$ 和 $[\mu]$ 的行数分别不能大于 $N+M$, N 和 M. 在分导表示 $[\omega]$ 的约化中, 杨图 $[\lambda]$ 的格数 n_1 和杨图 $[\mu]$ 的格数 n_2 是不固定的, 只要求它们之和等于杨图 $[\omega]$ 的格数 n. 对约化的每一项, 由式 (A36.2) 可确定 U(1) 子群的量子数, 它等于 $(-n_1/N+n_2/M)$, 在大统一模型中, 这量子数就是弱超荷 Y.

下面讨论 SU(5) 群的不可约表示作为子群 SU(3)$\otimes$SU(2) 的分导表示, 按子群不可约表示的分解. 在物理上的大统一模型里, 前一表示描写颜色 SU(3) 多重态, 后一表示描写弱电 SU(2) 多重态, 这些表示都用多重态的重数来标记. 下标给出 Y 量子数. 在 SU(5) 大统一模型中, 电荷 Q 等于弱电 SU(2) 的第三个生成元 T_3 和 Y 之和

$$\begin{aligned}
Q=T_3+Y\ &=\ \mathrm{diag}\,\{0,\ 0,\ 0,\ 1/2,\ -1/2\}\\
&\quad+\mathrm{diag}\,\{-1/3,\ -1/3,\ -1/3,\ 1/2,\ 1/2\}\\
&=\ \mathrm{diag}\,\{-1/3,\ -1/3,\ -1/3,\ 1,\ 0\}
\end{aligned}$$

$$\square \simeq \square \times [0] \oplus [0] \times \square$$

$$5 \simeq (3,\ 1)_{-1/3} \oplus (1,\ 2)_{1/2} \quad .$$

$$\begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix} \simeq \begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix} \times [0] \oplus \square \times \square \oplus [0] \times \begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}$$

$$10 \simeq (3^*,\ 1)_{-2/3} \oplus (3,\ 2)_{1/6} \oplus (1,\ 1)_1$$

$$\begin{smallmatrix}\square\square\\\square\\\square\\\square\end{smallmatrix} \simeq \begin{smallmatrix}\square\square\\\square\\\square\end{smallmatrix} \times \square \oplus \begin{smallmatrix}\square\\\square\\\square\end{smallmatrix} \times \square\square \oplus \begin{smallmatrix}\square\\\square\\\square\end{smallmatrix} \times \begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}$$

$$\oplus \begin{smallmatrix}\square\square\\\square\end{smallmatrix} \times \begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix} \oplus \begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix} \times \begin{smallmatrix}\square\square\\\square\end{smallmatrix}$$

$$24 \simeq (3,\ 2)_{-5/6} \oplus (1,\ 3)_0 \oplus (1,\ 1)_0 \oplus (8,\ 1)_0 \oplus (3^*,\ 2)_{5/6}$$

在 SU(5) 大统一模型中, 粒子区分左手态和右手态, 分别填充到 5 维和 10 维多重态中. 第一代粒子的填充法如下

$$\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \mathrm{e}^c \\ \nu^c \end{pmatrix}_{\mathrm{R}}, \qquad \begin{pmatrix} 0 & u_3^c & -u_2^c & u_1 & d_1 \\ & 0 & u_1^c & u_2 & d_2 \\ & & 0 & u_3 & d_3 \\ & & & 0 & e^c \\ & & & & 0 \end{pmatrix}_{\mathrm{L}}$$

其中, 上标 c 表电荷共轭态, 下标 R 和 L 表右手态和左手态. 10 维表示是反对称张量表示, 因而只需填出上半个矩阵的粒子态. 24 维表示是伴随表示, 对应规范粒子, 这里不再列出.

附录 37　SU(N) 群三阶卡西米尔不变量

由生成元组成, 又能与所有生成元对易的算符称为卡西米尔 (Casimir) 算子, 它的本征值称为卡西米尔不变量. 卡西米尔算子在物理和数学中都十分重要. 物理中, 它与守恒量有密切联系. 数学中, 它可用来标记不可约表示. 数学中证明, 李群独立的卡西米尔算子数目等于李群的秩数, 即李群中能互相对易的生成元的最大数目. 对 SU(N) 群, 有 $N-1$ 个独立的卡西米尔算子, 其中用得最多的是二阶和三阶卡西米尔算子, 它们分别可表为生成元的二次和三次齐次多项式. 二阶卡西米尔算子及

其不变量在第七章已有详细讨论, 见式 (7.144)、(7.145) 和 (7.147). 本附录重点讨论 SU(N) 群三阶卡西米尔不变量.

设 $I_A^{[\lambda]}$ 是 SU(N) 群表示 $D^{[\lambda]}(u)$ 的生成元, 则它们构成伴随表示的基 [见式 (7.8)]

$$D^{[\lambda]}(u)^{-1}I_A^{[\lambda]}D^{[\lambda]}(u)=\sum_{A'}D^{\mathrm{ad}}_{AA'}(u)I_{A'}^{[\lambda]} \tag{A37.1}$$

其中, 用到伴随表示是实正交表示. 对自身表示, $I_A^{[\lambda]}$ 取 T_A, $D^{[\lambda]}(u)$ 取 u. 由自身表示生成元 T_A 可以构造出对变换式 (A37.1) 的一个三阶对称张量 f_{ABC} 和一个三阶反对称张量 d_{ABC}[见式 (7.78) 和 (A26.3)]

$$\begin{aligned} f_{ABC}&=-2\mathrm{i}\mathrm{Tr}\left(T_A\ [T_B,\ T_C]\right)=-2\mathrm{i}\mathrm{Tr}\left(T_AT_BT_C-T_AT_CT_B\right),\\ d_{ABC}&=2\mathrm{Tr}\left(T_A\ \{T_B,\ T_C\}\right)=2\mathrm{Tr}\left(T_AT_BT_C+T_AT_CT_B\right)\end{aligned} \tag{A37.2}$$

f_{ABC} 和 d_{ABC} 都是关于伴随表示的不变张量. 以 f_{ABC} 为例来证明

$$\begin{aligned} f_{ABC}\quad&\longrightarrow\sum_{A'B'C'}D^{\mathrm{ad}}_{AA'}(u)D^{\mathrm{ad}}_{B'B}(u)D^{\mathrm{ad}}_{C'C}(u)f_{A'B'C'}\\ &=\ -2\mathrm{i}\mathrm{Tr}\left(u^{-1}T_Au\left[u^{-1}T_Bu,\ u^{-1}T_Cu\right]\right)=f_{ABC}\end{aligned}$$

间接地, 这两个张量也可看成是 SU(N) 群的不变张量. 根据立特武德 - 理查德森规则, 除了 $N=2$ 外, SU(N) 群的两个伴随表示直乘的克莱布施 - 戈登级数中, 只包含一个恒等表示和两个伴随表示, 因而三个伴随表示直乘后只包含两个恒等表示, 即关于伴随表示不变的三阶张量只有这两个张量. 换句话说, 关于伴随表示不变的三阶反对称张量一定与 f_{ABC} 成比例, 关于伴随表示不变的三阶对称张量一定与 d_{ABC} 成比例. 对 SU(2) 群, $d_{ABC}=0$, 三个伴随表示直乘后只包含一个恒等表示, 关于伴随表示不变的三阶张量一定是反对称张量, 而且与 f_{ABC} 成比例.

现在把式 (A37.2) 中的自身表示生成元 T_A 换成任意不可约表示 $[\lambda]$ 的生成元 $I_A^{[\lambda]}$, 同样可证等式右面的张量是关于伴随表示不变的三阶反对称或对称张量, 因此它们一定与 f_{ABC} 或 d_{ABC} 成比例, 比例系数依赖于所取表示

$$-2\mathrm{i}\mathrm{Tr}\left(I_A^{[\lambda]}\ \left[I_B^{[\lambda]},\ I_C^{[\lambda]}\right]\right)=2T_2\left([\lambda]\right)f_{ABC} \tag{A37.3}$$

$$2\mathrm{Tr}\left(I_A^{[\lambda]}\ \left\{I_B^{[\lambda]},\ I_C^{[\lambda]}\right\}\right)=A\left([\lambda]\right)d_{ABC} \tag{A37.4}$$

前式左面的对易关系可用结构常数表出

$$-2\mathrm{i}\mathrm{Tr}\left(I_A^{[\lambda]}\ \left[I_B^{[\lambda]},\ I_C^{[\lambda]}\right]\right)=2\sum_D f_{DBC}\mathrm{Tr}\left(I_A^{[\lambda]}I_D^{[\lambda]}\right)$$

比较得

$$\mathrm{Tr}\left(I_A^{[\lambda]}I_D^{[\lambda]}\right)=\delta_{AD}T_2\left([\lambda]\right)$$

它通过式 (7.147) 与二阶卡西米尔不变量 $C_2([\lambda])$ 相联系

$$d_{[\lambda]}(\mathrm{SU}(N))\ C_2\left([\lambda]\right) = (N^2-1)\ T_2\left([\lambda]\right) \tag{A37.5}$$

$C_2([\lambda])$ 可由式 (7.145) 计算. 这里简单介绍用附录 36 给出的结果计算 $T_2\left([\lambda]\right)$ 的方法. 根据定义式 (A37.3), 等价表示的 T_2 相等, 表示的直和和直积有

$$T_2([\lambda]\oplus[\mu]) = T_2([\lambda]) + T_2([\mu]), \quad T_2([\lambda]\times[\mu]) = d_{[\mu]}T_2([\lambda]) + d_{[\lambda]}T_2([\mu]) \tag{A37.6}$$

其中, $d_{[\lambda]}$ 是表示 $[\lambda]$ 的维数. 把 SU(2) 群的 $T_2\left([\lambda]\right)$ 记作 $T_2^{(0)}\left([\lambda]\right)$, 直接计算得

$$T_2^{(0)}([\lambda]) = \mathrm{Tr}\left[\left(T_3^{[\lambda]}\right)^2\right] = \sum_{n=-\lambda/2}^{\lambda/2} n^2 = \lambda(\lambda+1)(\lambda+2)/12 \tag{A37.7}$$

把 SU(N) 群的不可约表示 $[\lambda]$, 作为子群 SU$(N-2)\times$SU(2) 的分导表示, 按附录 36 给出的方法分解为子群不可约表示的直和

$$[\lambda] = \bigoplus [\nu]\times[\mu] \tag{A37.8}$$

其中, $[\nu]$ 是 SU$(N-2)$ 群的表示, $[\mu]$ 是 SU(2) 群的表示. 在式 (A37.3) 中, 取 $A=3$, $B=1$ 和 $C=2$, 则

$$T_2([\lambda]) = \mathrm{Tr}\left[\left(T_3^{[\lambda]}\right)^2\right] = \sum d_{[\nu]}[\mathrm{SU}(N-2)]T_2^{(0)}([\mu]) \tag{A37.9}$$

在量子场论中, $A\left([\lambda]\right)$ 与重整化反常有关, 它与三阶卡西米尔不变量有直接的联系. 为了具体计算 $A([\lambda])$, 先研究它的基本性质. 等价表示的 A 相等. 恒等表示有 $A([1^N])=0$, 自身表示有 $A([1])=1$. 幺正表示 $[\lambda]$ 的复共轭表示 $[\lambda]^*$, 生成元取转置并差负号, 因而 $A([\lambda]^*)=-A([\lambda])$. 对表示的直和和直积有

$$A([\lambda]\oplus[\mu]) = A([\lambda]) + A([\mu]), \quad A([\lambda]\times[\mu]) = d_{[\mu]}A([\lambda]) + d_{[\lambda]}A([\mu]) \tag{A37.10}$$

SU(2) 群的 $d_{ABC}=0$, 因而只有当 $N\geqslant 3$ 时 $A([\lambda])$ 才有意义. 对 SU(3) 群, 把 $A([\lambda])$ 记作 $A^{(0)}([\lambda])$, 在式 (A37.4) 中取 $A=8$, $B=C=3$, $d_{338}=\sqrt{1/3}$, 得

$$A^{(0)}([\lambda]) = 4\sqrt{3}\mathrm{Tr}\left\{T_8^{[\lambda]}(T_3^{[\lambda]})^2\right\} \tag{A37.11}$$

在平面权图中属同一水平线的权, $T_8^{[\lambda]}$ 的本征值相同, 把这些权对应的 $\left(T_3^{[\lambda]}\right)^2$ 按公式 (A37.7) 先算出来, 然后再对各水平线求和, 可以算得 $A^{(0)}([\lambda])$. 对一行的杨图,

$I_8^{[\lambda,0]}$ 的对角元分别取 $\sqrt{1/12}(\lambda-3m),\ 0\leqslant m\leqslant\lambda$

$$\begin{aligned}A^{(0)}([\lambda,0]) &= -A^{(0)}([\lambda,0]^*) = 2\sum_{m=0}^{\lambda}(\lambda-3m)T_2^{(0)}([\lambda-m]) \\ &= (1/6)\sum_{m=0}^{\lambda}(\lambda-3m)(\lambda-m)(\lambda-m+1)(\lambda-m+2) \\ &= (1/120)\lambda(\lambda+1)(\lambda+2)(\lambda+3)(2\lambda+3)\end{aligned} \tag{A37.12}$$

最后一式可以这样得到: 求和式必定可表为 λ 的五次代数式, 而且无常数项, 然后用 $\lambda=1$ 至 5 代入比较即可确定有关系数. 对两行的杨图 $[(\lambda+\tau),\tau]\simeq[\lambda]\backslash[\tau]^*$, $\tau\leqslant\lambda$, 根据式 (A37.10) 有

$$\begin{aligned}&A^{(0)}([\lambda+\tau,\tau]) = A^{(0)}([\lambda,0]\backslash[\tau,0]^*) \\ &\quad = A^{(0)}([\lambda,0]\times[\tau,0]^*) - A^{(0)}([\lambda-1,0]\times[\tau-1,0]^*) \\ &A^{(0)}([\lambda,0]\times[\tau,0]^*) = d_{[\tau]}[\mathrm{SU}(3)])A^{(0)}([\lambda,0]) - d_{[\lambda]}[\mathrm{SU}(3)]A^{(0)}([\tau,0]) \\ &\quad = \frac{1}{240}(\lambda+1)(\lambda+2)(\tau+1)(\tau+2)\times\{\lambda(\lambda+3)(2\lambda+3)-\tau(\tau+3)(2\tau+3)\}\end{aligned}$$

由此算得

$$A^{(0)}([\lambda+\tau,\tau]) = \frac{1}{120}(\lambda+1)(\tau+1)(\lambda-\tau)(\lambda+\tau+2)(\lambda+2\tau+3)(2\lambda+\tau+3) \tag{A37.13}$$

当 $\lambda=\tau$ 时, 杨图 $[2\lambda,\lambda]$ 的平面权图对原点对称, 故 $A^{(0)}([2\lambda,\lambda])=0$, 因而式 (A37.13) 包含因子 $(\lambda-\tau)$.

把 SU(N) 群的不可约表示 $[\lambda]$, 作为子群 SU($N-3$)⊗SU(3) 的分导表示, 按附录 36 给出的方法分解为子群不可约表示的直和

$$[\lambda] = \bigoplus [\nu]\times[\mu] \tag{A37.14}$$

其中, $[\nu]$ 是 SU($N-3$) 群的表示, $[\mu]$ 是 SU(3) 群的表示. 在式 (A37.4) 中, 取 $A=8$, $B=C=3$, 则

$$A([\lambda]) = 4\sqrt{3}\mathrm{Tr}\left\{I_8\left(I_3^{[\lambda]}\right)^2\right\} = \sum d_{[\nu]}[\mathrm{SU}(N-3)]A^{(0)}([\mu]) \tag{A37.15}$$

例如, 对反对称表示 $[1^r]$, 有

$$\begin{aligned}A([1^r]) &= \left\{d_{[1^{r-1}]}(\mathrm{SU}(N-3)) - d_{[1^{r-2}]}(\mathrm{SU}(N-3))\right\}A^{(0)}([1]) \\ &= \frac{(N-3)!}{(r-1)!(N-r-2)!} - \frac{(N-3)!}{(r-2)!(N-r-1)!} \\ &= \frac{(N-3)!\{(N-r-1)-(r-1)\}}{(r-1)!(N-r-1)!}\end{aligned}$$

$$= \frac{(N-2r)}{(r-1)} \begin{pmatrix} N-3 \\ r-2 \end{pmatrix} \tag{A37.16}$$

附录 38 雅可比坐标

对任意 N 个粒子构成的孤立系统具有空间平移对称性, 势能函数 V 在空间平移变换中保持不变. N 个粒子的坐标矢量和质量分别用 $\boldsymbol{r}_k$ 和 m_k $(k=1,2,\cdots,N)$ 标记, 定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2} \triangle \Psi + V\Psi = E\Psi, \qquad \triangle = \sum_{k=1}^{N} m_k^{-1} \triangle_{\boldsymbol{r}_k} \tag{A38.1}$$

其中, $\triangle_{\boldsymbol{r}_k}$ 是关于坐标矢量 $\boldsymbol{r}_k$ 的拉普拉斯算符.

引进 N 个雅可比坐标矢量 $\boldsymbol{R}_j$ $[0 \leqslant j \leqslant (N-1)]$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{R}_0 &= M^{-1/2} \sum_{k=1}^{N} m_k \boldsymbol{r}_k \\ \boldsymbol{R}_j &= (\mu_j)^{1/2} \left(\boldsymbol{r}_j - \sum_{k=j+1}^{N} \frac{m_k \boldsymbol{r}_k}{M_{j+1}} \right) \\ M_j &= \sum_{k=j}^{N} m_k, \quad M_1 = M \ \text{是总质量} \end{aligned} \tag{A38.2}$$

其中, $\boldsymbol{R}_0$ 描写质心的运动, $\boldsymbol{R}_1$ 描写第一个粒子相对其余粒子质心的运动, $\boldsymbol{R}_2$ 描写第二个粒子相对后 $N-2$ 个粒子质心的运动, 以此类推. 为方便起见, 我们让雅可比坐标矢量包含一个附加的因子 $M^{1/2}$, 以消除变换后方程中的质量参数. $\boldsymbol{R}_j$ 前面的"折合质量"μ_j 由下面条件定出

$$\sum_{k=1}^{N} m_k \boldsymbol{r}_k^2 = \sum_{j=0}^{N-1} \boldsymbol{R}_j^2 \tag{A38.3}$$

可选取特殊情况具体确定折合质量 μ_j. 设在质心系中前 $j-1$ 个粒子在原点, 后 $N-j$ 个粒子重合, 有

$$\boldsymbol{r}_k = 0, \qquad 1 \leqslant k < j,$$

$$\boldsymbol{r}_{j+1} = \boldsymbol{r}_{j+2} = \cdots = \boldsymbol{r}_N = -m_j \boldsymbol{r}_j / M_{j+1}$$

于是

$$\boldsymbol{R}_k = 0, \qquad k \neq j$$

得

$$\sum_{k=j}^{N} m_k \boldsymbol{r}_k^2 = m_j \boldsymbol{r}_j^2 + M_{j+1} \left(-m_j \boldsymbol{r}_j / M_{j+1}\right)^2 = \left(m_j M_j / M_{j+1}\right) \boldsymbol{r}_j^2$$
$$= \boldsymbol{R}_j^2 = \mu_j \left[\boldsymbol{r}_j + m_j \boldsymbol{r}_j / M_{j+1}\right]^2 = \mu_j \left[M_j \boldsymbol{r}_j / M_{j+1}\right]^2$$

由此算出第 j 个粒子的折合质量 μ_j 为

$$\mu_j = \frac{m_j M_{j+1}}{M_j} \tag{A38.4}$$

为了计算变量替换后拉普拉斯算符和总轨道角动量算符的表达式, 我们引入变换矩阵 X, 把式 (A38.2) 表为

$$\boldsymbol{R}_j = \sum_{k=1}^{N} X_{jk} m_k^{1/2} \boldsymbol{r}_k, \qquad \nabla_{\boldsymbol{r}_k} = m_k^{1/2} \sum_{j=0}^{N-1} X_{jk} \nabla_{\boldsymbol{R}_j} \tag{A38.5}$$

代入式 (A38.3)

$$\sum_{k=1}^{N} m_k \boldsymbol{r}_k^2 = \sum_{j=0}^{N-1} \boldsymbol{R}_j^2 = \sum_{kt} \left(m_k m_t\right)^{1/2} \boldsymbol{r}_k \boldsymbol{r}_t \sum_{j=0}^{N-1} X_{jk} X_{jt}$$

可见 X 是实正交矩阵, 且

$$\boldsymbol{r}_k = m_k^{-1/2} \sum_{j=0}^{N-1} \boldsymbol{R}_j X_{jk} \tag{A38.6}$$

由此, 拉普拉斯算符 $\triangle$ 和系统总轨道角动量算符 $\boldsymbol{L}$ 可直接用雅可比坐标矢量表出

$$\begin{aligned}
\triangle &= \sum_{k=1}^{N} m_k^{-1} \nabla_{\boldsymbol{r}_k}^2 \\
&= \sum_{jj'} \nabla_{\boldsymbol{R}_j} \cdot \nabla_{\boldsymbol{R}_{j'}} \sum_{k=1}^{N} m_k^{-1} \left(X_{jk} m_k^{1/2}\right) \left(X_{j'k} m_k^{1/2}\right) = \sum_{j=0}^{N-1} \nabla_{\boldsymbol{R}_j}^2, \\
L_{ab} &= -\mathrm{i} \sum_{k=1}^{n} \left\{ r_{ka} \frac{\partial}{\partial r_{kb}} - r_{kb} \frac{\partial}{\partial r_{ka}} \right\} \\
&= -\mathrm{i} \sum_{k=1}^{n} \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{j'=0}^{n-1} \left\{ R_{ja} \left(X_{jk} m_k^{-1/2}\right) \left(X_{j'k} m_k^{1/2}\right) \frac{\partial}{\partial R_{j'b}} \right. \\
&\qquad \left. - R_{j'b} \left(X_{j'k} m_k^{-1/2}\right) \left(X_{jk} m_k^{1/2}\right) \frac{\partial}{\partial R_{ka}} \right\} \\
&= -\mathrm{i} \sum_{j=0}^{n-1} \left\{ R_{ja} \frac{\partial}{\partial R_{jb}} - R_{jb} \frac{\partial}{\partial R_{ja}} \right\}
\end{aligned} \tag{A38.7}$$

于是方程 (A38.1) 经变换后, $\boldsymbol{R}_0$ 可以分离出去. 换句话说, 在质心系中, $\boldsymbol{R}_0 = 0$, N 体系统的薛定谔方程 (A38.1) 简化为

$$\triangle \Psi = \sum_{j=1}^{N-1} \triangle_{\boldsymbol{R}_j} \Psi = -\frac{2}{\hbar^2}(E - V)\,\Psi \tag{A38.8}$$

雅可比坐标矢量 $\boldsymbol{R}_j$ 的 $3(N-1)$ 个分量在拉普拉斯算符中地位平等, 因此拉普拉斯算符具有 $\mathrm{O}(3N-3) \supset \mathrm{SO}(3)\times\mathrm{O}(N-1)$ 对称性, 其中子群 SO(3) 就是通常的三维空间转动群, 子群 $\mathrm{O}(N-1)$ 包含空间反演和 N 个粒子间的置换变换. 改变雅可比坐标矢量的定义也相当一个 $\mathrm{O}(N-1)$ 变换. 这里特别要讨论一下置换变换. 在置换 $(k,\ k+1)$ 中, $m_k \longleftrightarrow m_{k+1}$ 和 $\boldsymbol{r}_k \longleftrightarrow \boldsymbol{r}_{k+1}$, 有

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{R}'_j &= \boldsymbol{R}_j, \qquad j \neq k \ \text{或} \ k+1, \\
\boldsymbol{R}'_k &= \left[\frac{m_{k+1}}{M_k\,(m_k + M_{k+2})}\right]^{1/2}\left[(m_k + M_{k+2})\,\boldsymbol{r}_{k+1} - m_k\boldsymbol{r}_k - \sum_{j=k+2}^{N} m_j\boldsymbol{r}_j\right] \\
&= -\boldsymbol{R}_k\cos\theta_k + \boldsymbol{R}_{k+1}\sin\theta_k, \\
\boldsymbol{R}'_{k+1} &= \left[\frac{m_k}{(m_k + M_{k+2})\,M_{k+2}}\right]^{1/2}\left[M_{k+2}\boldsymbol{r}_k - \sum_{j=k+2}^{N} m_j\boldsymbol{r}_j\right] \\
&= \boldsymbol{R}_k\sin\theta_k + \boldsymbol{R}_{k+1}\cos\theta_k, \\
\cos\theta_k &= \left[\frac{m_k m_{k+1}}{M_{k+1}\,(m_k + M_{k+2})}\right]^{1/2}, \qquad \sin\theta_k = \left[\frac{M_k M_{k+2}}{M_{k+1}\,(m_k + M_{k+2})}\right]^{1/2}
\end{aligned} \tag{A38.9}$$

这显然属于 $\mathrm{O}(N-1)$ 变换. 对全同粒子体系, $\cos\theta_k = (N-k)^{-1}$.

容易得到式 (A38.2) 的逆变换为

$$\boldsymbol{r}_k = \left[\frac{M_{k+1}}{m_k M_k}\right]^{1/2}\boldsymbol{R}_k - \sum_{j=1}^{k-1}\left[\frac{m_j}{M_j M_{j+1}}\right]^{1/2}\boldsymbol{R}_j + M^{-1/2}\boldsymbol{R}_0,$$

$$\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j = \left[\frac{M_{k+1}}{m_k M_k}\right]^{1/2}\boldsymbol{R}_k - \sum_{i=j+1}^{k-1}\left[\frac{m_i}{M_i M_{i+1}}\right]^{1/2}\boldsymbol{R}_i - \left[\frac{M_j}{m_j M_{j+1}}\right]^{1/2}\boldsymbol{R}_j \tag{A38.10}$$

通过式 (A38.10) 可以把势函数 V 表为 $\boldsymbol{R}_j$ 的函数, 与 $\boldsymbol{R}_0$ 无关.

附录 39　高维空间狄拉克方程的径向方程

在 N 维空间引入球坐标

$$\begin{aligned}
&x^1 = r\cos\theta_1 \sin\theta_2 \cdots \sin\theta_{N-1}, \\
&x^2 = r\sin\theta_1 \sin\theta_2 \cdots \sin\theta_{N-1}, \\
&x^b = r\cos\theta_{b-1} \sin\theta_k \cdots \sin\theta_{N-1}, \qquad 3 \leqslant b \leqslant N-1, \\
&x^N = r\cos\theta_{N-1}, \\
&\sum_{a=1}^{N} (x^a)^2 = r^2
\end{aligned} \tag{A39.1}$$

沿 $\boldsymbol{x}$ 方向的单位矢量记作 $\hat{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{x}/r$. 组态空间的体积元为

$$\begin{aligned}
&\prod_{a=1}^{N} \mathrm{d}x^a = r^{N-1}\mathrm{d}r\mathrm{d}\boldsymbol{\Omega}, \qquad \mathrm{d}\boldsymbol{\Omega} = \prod_{a=1}^{N-1} (\sin\ \theta_a)^{a-1}\,\mathrm{d}\theta_a, \\
&0 \leqslant r \leqslant \infty, \qquad -\pi \leqslant \theta_1 \leqslant \pi, \qquad 0 \leqslant \theta_b \leqslant \pi, \qquad 2 \leqslant b \leqslant N-1
\end{aligned} \tag{A39.2}$$

按照文献 [11] 的符号, 把狄拉克方程推广到任意 N 维空间和一维时间

$$\mathrm{i}\sum_{\mu=0}^{N} \gamma^{\mu} \left(\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} + \mathrm{i}eA_{\mu}\right) \varPsi(\boldsymbol{x},t) = M\varPsi(\boldsymbol{x},t) \tag{A39.3}$$

其中, M 是粒子质量. 为简化起见, 取自然单位, $\hbar = c = 1$. $N+1$ 个 γ_{μ} 矩阵满足反对易关系

$$\gamma^{\mu}\gamma^{\nu} + \gamma^{\nu}\gamma^{\mu} = 2\eta^{\mu\nu}\mathbf{1} \tag{A39.4}$$

其中, 度规张量 $\eta^{\mu\nu}$ 为

$$\eta^{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu} = \begin{cases} \delta_{\mu\nu}, & \text{当}\ \mu = 0 \\ -\delta_{\mu\nu}, & \text{当}\ \mu \neq 0 \end{cases} \tag{A39.5}$$

讨论一个特殊情况, 规范势 A_{μ} 只有第零分量不为零, 且为球对称

$$eA_0 = V(r), \qquad A_a = 0, \qquad \text{当}\ a \neq 0 \tag{A39.6}$$

系统哈密顿量 $H(\boldsymbol{x})$ 表为

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial x^0}\varPsi(\boldsymbol{x},t) = H(\boldsymbol{x})\varPsi(\boldsymbol{x},t), \qquad H(\boldsymbol{x}) = -\mathrm{i}\sum_{a=1}^{N} \gamma^0\gamma^a \frac{\partial}{\partial x^a} + V(r) + \gamma^0 M \tag{A39.7}$$

轨道角动量算符 L_{ab}, 自旋角动量算符 S_{ab} 和总角动量算符 J_{ab} 分别定义为

$$L_{ab} = -L_{ba} = \mathrm{i}x_a \frac{\partial}{\partial x^b} - \mathrm{i}x_b \frac{\partial}{\partial x^a}, \qquad S_{ab} = -S_{ba} = \mathrm{i}\gamma_a\gamma_b/2,$$

$$J_{ab} = L_{ab} + S_{ab}, \qquad 1 \leqslant a < b \leqslant N,$$

$$J^2 = \sum_{a<b=2}^{N} J_{ab}^2, \qquad L^2 = \sum_{a<b=2}^{N} L_{ab}^2, \qquad S^2 = \sum_{a<b=2}^{N} S_{ab}^2 \tag{A39.8}$$

直接验算可知存在一个守恒量算符 κ, 它与 J_{ab} 和 $H(\boldsymbol{x})$ 都对易

$$\kappa = \gamma^0 \left\{ \sum_{a<b} \mathrm{i}\gamma^a\gamma^b L_{ab} + (N-1)/2 \right\} = \gamma^0 \left\{ J^2 - L^2 - S^2 + (N-1)/2 \right\} \tag{A39.9}$$

把谢瓦莱基式 (9.15) 和 (9.20) 中的 T_{ab} 换成 J_{ab}, L_{ab} 或 S_{ab}, 就得到角动量算符的谢瓦莱基. 下面分别讨论它们的本征状态.

在轨道空间, 因为只有一个坐标矢量 $\boldsymbol{x}$, 不能构成反对称组合, 所以对应轨道角动量的不可约表示只能是由一行杨图标记的表示, $[\ell] \equiv [\ell, 0, \cdots]$, 最高权为 $(\ell) \equiv (\ell, 0, \cdots, 0)$. N 维空间的轨道角动量本征函数, 即 $H_\mu(L)$ 的共同本征函数, 就是球谐函数 $\mathrm{Y}_{\boldsymbol{m}}^{[\ell]}(\hat{\boldsymbol{x}})$

$$H_\mu(L)\mathrm{Y}_{\boldsymbol{m}}^{[\ell]}(\hat{\boldsymbol{x}}) = m_\mu \mathrm{Y}_{\boldsymbol{m}}^{[\ell]}(\hat{\boldsymbol{x}}) \tag{A39.10}$$

最高权态的球谐函数已由式 (9.49) 给出, 其他权状态球谐函数可用降算符 $F_\mu(L)$ 作用得到. 球谐函数 $\mathrm{Y}_{\boldsymbol{m}}^{[\ell]}(\hat{\boldsymbol{x}})$ 对应的卡西米尔不变量已由式 (9.41) 给出

$$L^2\mathrm{Y}_{\boldsymbol{m}}^{[\ell]}(\hat{\boldsymbol{x}}) = C_2[(\ell)]\mathrm{Y}_{\boldsymbol{m}}^{[\ell]}(\hat{\boldsymbol{x}}), \qquad C_2[(\ell)] = \ell(\ell + N - 2) \tag{A39.11}$$

当 N 为奇数时, 取

$$\gamma^0 = \sigma_3 \times \mathbf{1}, \qquad \gamma^a = (\mathrm{i}\sigma_2) \times \beta_a, \qquad 1 \leqslant a \leqslant N \tag{A39.12}$$

其中, 奇数个矩阵 β_a 满足反对易关系

$$\beta_a\beta_b + \beta_b\beta_a = 2\delta_{ab}\mathbf{1}, \qquad a,\ b = 1,\ 2, \cdots,\ N \tag{A39.13}$$

可取式 (9.66) 和 (9.78) 形式, 维数为 $2^{(N-1)/2}$. 在此表象, 自旋算符 S_{ab} 和 κ 算符变成方块矩阵

$$S_{ab} = \mathbf{1} \times \overline{S}_{ab}, \qquad \overline{S}_{ab} = -\mathrm{i}\beta_a\beta_b/2 \tag{A39.14}$$

$$\kappa = \sigma_3 \times \overline{\kappa}, \qquad \overline{\kappa} = 2\sum_{a<b} \overline{S}_{ab}L_{ab} + (N-1)/2 \tag{A39.15}$$

算符 S_{ab} 和算符 $\overline{S}_{ab}$ 的关系相似于狄拉克自旋算符和泡利自旋算符的关系, 分别称为在全旋量空间和固有旋量空间的自旋算符. 在固有旋量空间, 对应基本旋量

表示 $(s) \equiv (0, \cdots, 0, 1)$ 的基本旋量为 $\chi(\boldsymbol{m})$, 由式 (7.145) 算得卡西米尔不变量为 $C_2[(s)] = (N^2 - N)/8$.

球谐函数和基本旋量函数的乘积, 对应两表示的直乘, $(\ell) \times (s)$. 按式 (9.113) 有

$$(\ell) \times (s) \simeq (\ell, 0, \cdots, 0, 1) \oplus (\ell - 1, 0, \cdots, 0, 1)$$

因此, 可有两种方法来构造属表示 $(j) \equiv (\ell, 0, \cdots, 0, 1)$ 的总角动量本征函数, 它们对应不同的 κ 本征值. 由式 (7.145) 算得表示 (j) 的卡西米尔不变量为

$$C_2[(j)] = \ell(\ell + N - 1) + (N^2 - N)/8 \tag{A39.16}$$

因为系统是球对称的, 所以我们只需要写出最高权态的波函数. 根据式 (9.17)、(9.23)、(9.46) 和 (9.47) 和最高权态的条件式 (7.123) 可算得

$$\begin{aligned}
\phi_{|K|,(j)}(\hat{\boldsymbol{x}}) &= \mathrm{Y}^{[\ell]}_{(\ell)}(\hat{\boldsymbol{x}})\chi[(s)] = C_{N,\ell} r^{-\ell}(x^1 + \mathrm{i}x^2)^\ell \chi[(s)], \\
|K| &= C_2[(j)] - C_2[(\ell)] - C_2[(s)] + (N-1)/2 = (2\ell + N - 1)/2, \\
\phi_{-|K|,(j)}(\hat{\boldsymbol{x}}) &= \sum_{\boldsymbol{m}} \mathrm{Y}^{[\ell+1]}_{\boldsymbol{m}}(\hat{\boldsymbol{x}})\chi[(j) - \boldsymbol{m}]\langle(\ell+1), \boldsymbol{m}, (s), (j) - \boldsymbol{m}|(j), (j)\rangle \\
&= \left\{\frac{2(\ell+1)}{N + 2\ell}\right\}^{1/2} C_{N,(\ell+1)} r^{-\ell-1}(x^1 + \mathrm{i}x^2)^\ell \left\{x^{2N+1}\chi[(s)]\right. \\
&\quad +(x^{2N-1} + \mathrm{i}x^{2N})\chi[(0, \cdots, 0, 1, \bar{1})] \\
&\quad +(x^{2N-3} + \mathrm{i}x^{2N-2})\chi[(0, \cdots, 0, 1, \bar{1}, 1)] + \cdots \\
&\quad \left. +(x^3 + \mathrm{i}x^4)\chi[(1, \bar{1}, 0, \cdots, 0, 1)] + (x^1 + \mathrm{i}x^2)\chi[(\bar{1}, 0, \cdots, 0, 1)]\right\}, \\
-|K| &= C_2[(j)] - C_2[(\ell+1)] - C_2[(s)] + (N-1)/2 = -(2\ell + N - 1)/2
\end{aligned} \tag{A39.17}$$

在全旋量空间, 对应表示 (j) 的总角动量最高权态波函数 $\Psi_{K,(j)}(\boldsymbol{x})$ 表为

$$\begin{aligned}
&\Psi_{K,(j)}(\boldsymbol{x}, t) = r^{-(N-1)/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et}\begin{pmatrix} F(r)\phi_{K,(j)}(\hat{\boldsymbol{x}}) \\ \mathrm{i}G(r)\phi_{-K,(j)}(\hat{\boldsymbol{x}}) \end{pmatrix} \\
&\kappa\Psi_{K,(j)}(\boldsymbol{x}) = K\Psi_{K,(j)}(\boldsymbol{x}), \qquad K = \pm(2\ell + N - 1)/2
\end{aligned} \tag{A39.18}$$

代入狄拉克方程 (A39.3), 得径向方程

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}G(r)}{\mathrm{d}r} + \frac{K}{r}G(r) &= [E - V(r) - M]F(r), \\
-\frac{\mathrm{d}F(r)}{\mathrm{d}r} + \frac{K}{r}F(r) &= [E - V(r) + M]G(r)
\end{aligned} \tag{A39.19}$$

此式对 $N = 3$ 也成立.

当 N 是大于 2 的偶数时, 有

$$\gamma^0 = \beta_{N+1}, \qquad \gamma^a = \beta_{N+1}\beta_a, \qquad 1 \leqslant a \leqslant N \tag{A39.20}$$

奇数个 β_a 矩阵满足式 (A39.13), 由式 (9.66) 和 (9.78) 定义, β_{N+1} 是对角矩阵. 对偶数 N 的 SO(N) 群, 旋量表示分解为两个不等价的基本旋量表示 $(+s) \equiv (0,0,\cdots,0,1)$ 和 $(-s) \equiv (0,0,\cdots,0,1,0)$ 的直和, 由式 (7.145) 算得卡西米尔不变量都为 $C_2[(\pm s)] = (N^2-N)/8$. γ^0 是对角矩阵, 一半对角元为 $+1$, 另一半为 -1. γ^0 把全旋量空间分解为两个固有旋量空间的直和. 现在自旋算符 S_{ab} 和 κ 算符都是与 γ^0 维数相同的矩阵, 且与 γ^0 对易, 因而都是两个子矩阵的直和, 分别属于两个固有旋量空间. 在两个固有旋量空间的基本旋量 $\chi_\pm(\boldsymbol{m})$ 分别对应基本旋量表示 $(+s)$ 和 $(-s)$, 满足

$$\gamma^0\chi_\pm(\boldsymbol{m}) = \pm\chi_\pm(\boldsymbol{m}) \tag{A39.21}$$

在每一个固有旋量空间, 把基本旋量和球谐函数相乘, 对应两表示的直乘, $(\ell)\times(\pm s)$. 按式 (9.114) 有

$$\begin{aligned}(\ell)\times(+s) &\simeq (\ell,0,\cdots,0,1)\oplus(\ell-1,0,\cdots,1,0)\\ (\ell)\times(-s) &\simeq (\ell,0,\cdots,1,0)\oplus(\ell-1,0,\cdots,0,1)\end{aligned} \tag{A39.22}$$

因此, 总角动量状态对应表示有两类, $(j_1) \equiv (\ell,0,\cdots,0,1)$ 和 $(j_2) \equiv (\ell,0,\cdots,0,1,0)$, 由式 (7.145) 算得它们的卡西米尔不变量都是

$$C_2[(j_1)] = C_2[(j_2)] = \ell(\ell+N-1) + (N^2-N)/8 \tag{A39.23}$$

按式 (A39.22), 属表示 $(j_1) \equiv (\ell,0,\cdots,0,1)$ 的总角动量本征函数有两组, 它们的最高权态分别为

$$\begin{aligned}\phi_{|K|,(j_1)}(\hat{\boldsymbol{x}}) &= \mathrm{Y}^{[\ell]}_{(\ell)}(\hat{\boldsymbol{x}})\chi_+[(+s)] = C_{N,\ell}r^{-\ell}(x^1+\mathrm{i}x^2)^\ell\chi_+[(+s)]\\ \phi_{-|K|,(j_1)}(\hat{\boldsymbol{x}}) &= \sum_{\boldsymbol{m}} \mathrm{Y}^{[\ell+1]}_{\boldsymbol{m}}(\hat{\boldsymbol{x}})\chi_-[(j_1)-\boldsymbol{m}]\langle(\ell+1),\boldsymbol{m},(-s),(j_1)-\boldsymbol{m}|(j_1),(j_1)\rangle\\ &= \left\{\frac{2(\ell+1)}{N+2\ell}\right\}^{1/2} C_{N,(\ell+1)}r^{-\ell-1}(x^1+\mathrm{i}x^2)^\ell\left\{(x^{2N-1}+\mathrm{i}x^{2N})\chi_-[(-s)]\right.\\ &\quad +(x^{2N-3}+\mathrm{i}x^{2N-2})\chi_-[(0,\cdots,0,1,\overline{1},0)]\\ &\quad +(x^{2N-5}+\mathrm{i}x^{2N-4})\chi_-[(0,\cdots,0,1,\overline{1},0,1)]+\cdots\\ &\quad \left.+(x^3+\mathrm{i}x^4)\chi_-[(1,\overline{1},0,\cdots,0,1)]+(x^1+\mathrm{i}x^2)\chi_-[(\overline{1},0,\cdots,0,1)]\right\}\end{aligned} \tag{A39.24}$$

属表示 (j_2) 的总角动量本征函数也有两组, 它们的最高权态分别为

$$
\begin{aligned}
\phi_{-|K|,(j_2)}(\hat{\boldsymbol{x}}) &= \sum_{\boldsymbol{m}} \mathrm{Y}^{[\ell+1]}_{\boldsymbol{m}}(\hat{\boldsymbol{x}})\chi_+[(j_2)-\boldsymbol{m}]\langle(\ell+1),\boldsymbol{m},(+s),(j_2)-\boldsymbol{m}|(j_2),(j_2)\rangle \\
&= \left\{\frac{2(\ell+1)}{N+2\ell}\right\}^{1/2} C_{N,(\ell+1)}r^{-\ell-1}(x^1+\mathrm{i}x^2)^\ell \left\{(x^{2N-1}-\mathrm{i}x^{2N})\chi_+[(+s)]\right. \\
&\quad +(x^{2N-3}+\mathrm{i}x^{2N-2})\chi_+[(0,\cdots,0,1,0,\overline{1})] \\
&\quad +(x^{2N-5}+\mathrm{i}x^{2N-4})\chi_+[(0,\cdots,0,1,\overline{1},1,0)]+\cdots \\
&\quad \left. +(x^3+\mathrm{i}x^4)\chi_+[(1,\overline{1},0,\cdots,0,1,0)]+(x^1+\mathrm{i}x^2)\chi_+[(\overline{1},0,\cdots,0,1,0)]\right\} \\
\phi_{|K|,(j_2)}(\hat{\boldsymbol{x}}) &= \mathrm{Y}^{[\ell]}_{(\ell)}(\hat{\boldsymbol{x}})\chi_-[(-s)] = C_{N,\ell}r^{-l}(x^1+\mathrm{i}x^2)^\ell\chi_-[(-s)]
\end{aligned}
\tag{A39.25}
$$

根据轨道角动量为 (ℓ) 还是 $(\ell+1)$, 算得卡西米尔不变量分别为

$$
\begin{aligned}
C_2[(j_\omega)]-C_2[(\ell)]-C_2[(+s)]+(N-1)/2 &= (2\ell+N-1)/2, \\
C_2[(j_\omega)]-C_2[(l+1)]-C_2[(+s)]+(N-1)/2 &= -(2\ell+N-1)/2
\end{aligned}
\tag{A39.26}
$$

其中, $\omega=1$ 或 2. 在全旋量空间, 对应不可约表示 (j_ω) 的总角动量本征函数的最高权态波函数为 $\Psi_{K,(j_\omega)}(\boldsymbol{x})$

$$
\begin{aligned}
&\Psi_{|K|,(j_1)}(\boldsymbol{x},t) = r^{-N+1/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et}\left\{F(r)\phi_{|K|,(j_1)}(\hat{\boldsymbol{x}})+\mathrm{i}G(r)\phi_{-|K|,(j_1)}(\hat{\boldsymbol{x}})\right\}, \\
&\Psi_{-|K|,(j_2)}(\boldsymbol{x},t) = r^{-N+1/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et}\left\{F(r)\phi_{-|K|,(j_2)}(\hat{\boldsymbol{x}})+\mathrm{i}G(r)\phi_{|K|,(j_2)}(\hat{\boldsymbol{x}})\right\}, \\
&\kappa\Psi_{K,(j_\omega)}(\boldsymbol{x}) = K\,\Psi_{K,(j_\omega)}(\boldsymbol{x}), \\
&K = \begin{cases} l+N-1/2, & \text{当 } \omega=1 \\ -l-N+1/2, & \text{当 } \omega=2 \end{cases}
\end{aligned}
\tag{A39.27}
$$

代入狄拉克方程 (A39.3) 得径向方程

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}G(r)}{\mathrm{d}r}+\frac{K}{r}G(r) = [E-V(r)-M]F(r), \\
&-\frac{\mathrm{d}F(r)}{\mathrm{d}r}+\frac{K}{r}F(r) = [E-V(r)+M]G(r)
\end{aligned}
\tag{A39.28}
$$

当 $N=4$ 时, SO(4) 群同态于 SU(2)×SU(2), 表示 $(+s)$ 和 $(-s)$ 分属两个不同的 SU(2) 子群. 当 $N=2$ 时, SO(2) 群是阿贝尔群, $K=\pm j=\pm 1/2,\ \pm 3/2,\ \cdots$. 然而, 式 (A39.28) 仍适用那些情况.

附录 40　李群的指数映照

如果李群的每一元素都属于一个单参数子李群, 则称该李群存在指数映照. 对矩阵李群, 如果它的任意群元素都可表为矩阵的指数函数形式, 且指数属对应实李代数, 则此李群存在指数映照. 紧致李群都存在指数映照. 非紧致李群不一定存在指数映照. 常见的非紧致李群中

$$\mathrm{SO}(2,1) \sim \mathrm{SL}(2,R) \approx \mathrm{SU}(1,1), \qquad L_p \sim \mathrm{SL}(2,C)$$

SO(2,1) 群和 L_p 群存在指数映照, 而 $\mathrm{SL}(2,R)$ 群, $\mathrm{SU}(1,1)$ 群和 $\mathrm{SL}(2,C)$ 群不存在指数映照.

$\mathrm{SL}(2,C)$ 群由二维幺模复矩阵组成, 在自身表示中实李代数由无迹矩阵的集合构成. 例如, 如下元素不能表为指数函数形式

$$A = \begin{pmatrix} -1 & -2 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -\mathrm{e}^{\sigma_1+\mathrm{i}\sigma_2}, \qquad B = \begin{pmatrix} -1-\mathrm{i} & -1 \\ -1 & -1+\mathrm{i} \end{pmatrix} = -\mathrm{e}^{\sigma_1+\mathrm{i}\sigma_3}$$

$\mathrm{SL}(2,R)$ 群是 $\mathrm{SL}(2,C)$ 群的子群, 由二维幺模实矩阵组成, 在自身表示中实李代数由无迹实矩阵的集合构成. 元素 A 也属于 $\mathrm{SL}(2,R)$ 群. $\mathrm{SU}(1,1)$ 群是 $\mathrm{SL}(2,C)$ 群的子群, 由满足 $u^\dagger\sigma_3 u = \sigma_3$ 的二维幺模矩阵 u 组成, 在自身表示中实李代数的基为 σ_1, σ_2 和 $\mathrm{i}\sigma_3$. 元素 B 也属于 $\mathrm{SU}(1,1)$ 群. 此外, $\mathrm{SL}(2,R)$ 群和 $\mathrm{SU}(1,1)$ 群还包含一些群元素, 如属此两李群的公共元素 C, 它虽可表为指数函数形式, 但指数上的矩阵不属于此两李群的实李代数,

$$C = \begin{pmatrix} -\cosh(\omega) & -\sinh(\omega) \\ -\sinh(\omega) & -\cosh(\omega) \end{pmatrix} = \exp\{\sigma_1(\omega+\mathrm{i}\pi)\}$$

参 考 文 献

1 G E Andrews. The Theory of Partitions. Encyclopedia of Mathematics and its applications, Ed. Gian-Carlo Rota, Addison-Wesley, 1976, 2

2 Y Akutsu and M Wadati. Knot invariants and the critical statistical systems. J. Phys. Soc. Jpn., 1987, 56: 839

3 Y Akutsu and M Wadati. Exactly solvable models and new link polynomials. I. N-state vertex models. J. Phys. Soc. Jpn., 1987, 56: 3039

4 J Alexander. Topological invariants of knots and links. Trans. Am. Math. Soc., 1928, 30: 275

5 B F Bayman. Some Lectures on Groups and Their Applications to Spectroscopy. Nordita, 1960
中译本: 群论及其在核谱学中的应用. 石生明译. 上海：上海科学技术出版社, 1963

6 R Berenson and J L Birman. Clebsch-Gordan coefficients for crystal space group. J. Math. Phys., 1975, 16: 227

7 L C Biedenharn, A Giovannini and J D Louck. Canonical definition of Wigner coefficients in $U(n)$. J. Math. Phys., 1970, 11: 2368

8 L C Biedenharn and J D Louck. Angular Momentum in Quantum Physics, Theory and application. Encyclopedia of Mathematics and its Application, Ed. G. C. Rota, Addison-Wesley, Massachusetts, 1981, 8

9 J Birman. On the Jones polynomial of closed 3-braids. Invent. Math., 1985, 81: 287

10 J Birman and H Wenzl. Braids, link polynomials and a new algebra. Trans. Amer. Math. Soc., 1989, 313: 249

11 J D Bjorken and S D Drell. Relativistic Quantum Mechanics. New York: McGraw-Hill Book Co., 1964

12 H Boerner. Representations of Groups. Amsterdam: North-Holland, 1963

13 M R Bremner, R V Moody and J Patera. Tables of Dominant Weight Multiplicities for Representations of Simple Lie Algebras. Pure and Applied Mathematics, A Series of Monographs and Textbooks 90, New York: Marcel Dehker, 1985

14 G Burns and A M Glazer. Space Groups for Solid State Scientists. New York: Academic Press, 1978

15 陈金全. 群表示论的新途径. 上海：上海科学技术出版社, 1984

16 J Q Chen, P N Wang, Z M Lu and X B Wu. Tables of the Clebsch-Gordan, Racah and Subduction Coefficients of $SU(n)$ Groups. Singapore: World Scientific, 1987

17 J Q Chen. Group Representation Theory for Physicsts. World Scientific, Singapore, 1989; J Q Chen, J L Ping and F Wang. Group Representation Theory for Physicsts. 2nd Edition, Singapore: World Scientific, 2002

18 J Q Chen and J L Ping. Algebraic expressions for irreducible bases of icosahedral group. J. Math. Phys., 1997, 38: 387

19 F A Cotton. Chemical Applications of Group Theory. New York: Wiley, 1971
中译本: 群论在化学中的应用. 刘春万, 游效曾, 赖伍江译, 北京：科学出版社, 1987

20 戴安英. 计算 $SO(N)$ 群不可约旋量表示维数的一种图形规则. 兰州大学学报 (自然科学版), 1983, 19(2): 33

21 J J de Swart. The octet model and its Clebsch-Gordan coefficients. Rev. Mod. Phys., 1963, 35: 916

22 邓金. 半单纯李氏代数的结构. 曾肯成译, 北京: 科学出版社, 1954

23 Y Deng and C N Yang. Eigenvalues and eigenfunctions of the Hückel Hamiltonian for carbon-60. Phys. Lett., 1992, A170: 116

24 丁培柱, 王毅. 群及其表示. 北京：高等教育出版社, 1990

25 P A M Dirac. The Principle of Quantum Mechanics. Oxford: Clarendon Press, 1958
中译本: 量子力学原理. 陈咸亨译, 北京：科学出版社, 1979

26 A R Edmonds. Angular Momentum in Quantum Mechanics. Princeton: Princeton University Press, 1957

27 J P Elliott and P G Dawber. Symmetry in Physics. London: McMillan Press, 1979.
中译本: 物理学中的对称性. 仝道荣译, 北京：科学出版社, 1986

28 Feng Kang. The Hamiltonian way for computing Hamiltonian dynamics. Applied and Industrial Mathematics, ed. by R Spigler, Kluwer Academic Publishers, 1991, 17~35

29 C Fronsdal. Group theory and applications to particle physics. 1962, Brandies Lectures, ed. by K W Ford, Benjamin, New York, 1963, 1: 427

30 高崇寿. 群论及其在粒子物理学中的应用. 北京: 高等教育出版社, 1992

31 I M Gel'fand, R A Minlos and Z Ya Shapiro. Representations of the Rotation and Lorentz Groups and Their Applications, translated from Russian by G Cummins and T Boddington. New York: Pergamon Press, 1963

32 I M Gel'fand and M L Zetlin. Matrix elements for the unitary groups. Dokl. Akad. Nauk., 1950, 71: 825

33 M Gell-Mann and Y Ne'eman. The Eightfold Way. New York: Benjamin, 1964

34 H Georgi. Lie Algebras in Particle Physics. New York: Benjamin, 1982

35 R Gilmore. Lie Groups, Lie Algebras and Some of Their Applications. Wiley, New York, 1974

36 C H Gu and C N Yang. A one-dimensional N fermion problem with factorized S matrix. Commun. Math. Phys., 1989, 122: 105

37 X Y Gu, B Duan and Z Q Ma. Independent eigenstates of angular momentum in a quantum N-body system. Phys. Rev., 2001, A64: 042108(1~14)

38 X Y Gu, Z Q Ma and J Q Sun. Quantum four-body system in D dimensions. J. Math. Phys., 2003, 44: 3763

39 X Y Gu, Z Q Ma and S H Dong. The Levinson theorem for the Dirac equation in $D+1$ dimensions. Phys. Rev., 2003, A67: 062715(1~12)

40 A Gyoja. A q-analogue of Young symmetrizer. Osaka J. Math., 1986, 23:841

41 M Hamermesh. Group Theory and its Application to Physical Problems. Addison-Wesley, Massachusetts, 1962

42 韩其智, 孙洪洲. 群论. 北京: 北京大学出版社, 1987

43 孙洪洲, 韩其智. 李代数李超代数及在物理中的应用. 北京：北京大学出版社, 1999

44 V Heine. Group Theory in Quantum Mechanics. London: Pergamon Press, 1960

45 Bo-Yu Hou, Bo-Yuan Hou and Zhong-Qi Ma. Clebsch-Gordan coefficients, Racah coefficients and braiding fusion of quantum $s\ell(2)$ enveloping algebra I. Commun. Theor. Phys., 1990, 13:181

46 Bo-Yu Hou, Bo-Yuan Hou and Zhong-Qi Ma. Clebsch-Gordan coefficients, Racah coefficients and braiding fusion of quantum $s\ell(2)$ enveloping algebra II. Commun. Theor. Phys., 1990, 13:341

47 侯伯元, 侯伯宇. 物理学家用微分几何. 北京：科学出版社, 1990(第二版 2004)

48 K S Huang. Statistical Mechanics. New York: Wiley, 1963
49 C Itzykson and M Nauenberg. Unitary groups: Representations and decompositions. Rev. Mod. Phys., 1966, 38: 95
50 A W Joshi. Elements of Group Theory for Physicists. New York: Wiley, 1977
中译本: 物理学中的群论基础. 王锡绂, 刘秉正, 赵展岳, 吴兆颜译, 北京: 科学出版社, 1985
51 D Kazdan and G Lusztig. Representations of Coxeter Groups and Hecke algebras. Invent. Math., 1979, 53: 165
52 G F Koster. Space Groups and Their Representations in Solid State Physics. ed. by F. Seitz and D. Turnbull. New York: Academic Press, 1957, 5:174
53 O V Kovalev. Irreducible Representations of Space Groups, translated from Russian by A. M. Gross. Gordon & Breach, 1961
54 李世雄, 代数方程与置换群. 上海: 上海教育出版社, 1981
55 H J Lipkin. Lie Groups for Pedestrians. Amsterdam: North-Holland, 1965
56 D E Littlewood. The Theory of Group Characters. Oxford: Oxford University Press, 1958
57 Fa Liu, Jia-Lun Ping and Jin-Quan Chen. Application of the eigenfunction method to the icosahedral group. J. Math. Phys., 1990, 31: 1065
58 马中骐, 戴安英. 计算 $SO(N)$ 群不可约张量表示维数的一种图形规则. 兰州大学学报 (自然科学版),1982, 18(2): 97
59 马中骐, 戴安英. 群论及其在物理中的应用. 北京: 北京理工大学出版社, 1988
60 Z Q Ma, D M Tong and B Zhou. Finite dimensional representations of braid groups. Commun. Theor. Phys., 1992, 18:369
61 马中骐. 杨－巴克斯特方程和量子包络代数. 北京: 科学出版社, 1993
62 Zhong-Qi Ma. Yang-Baxter Equation and Quantum Enveloping Algebras. Singapore: World Scientific, 1993
63 马中骐. 物理学中的群论. 第一版. 北京: 科学出版社, 1998
64 马中骐. 群论习题精解. 北京: 科学出版社, 2002
65 Zhong-Qi Ma and Xiao-Yan Gu. Problems and Solutions in Group Theory for Physicists. Singapore: World Scientific, 2004
66 R E Marshak, Riazuddin and C P Ryan. Theory of Weak Interactions in Particle Physics. New York: Wiley, 1969
67 W Miller, Jr. Symmetry Groups and Their Applications. New York: Academic Press, 1972
中译本: 对称性群及其应用. 栾德怀, 冯承天, 张民生译. 北京: 科学出版社, 1981
68 G Racah. Group Theory and Spectroscopy. Lecture Notes in Princeton, 1951
中译本: 群论和核谱. 梅向明译. 北京: 高等教育出版社, 1959
69 Shang-Yuan Ren. Two types of electronic states in one-dimensional crystals of finite length. Ann. Phys., 2002, 301: 22
70 D Rolfsen. Knots and Links. Mathematics Lecture Series, Berkeley: Publish or Perish, 1976
71 P Roman. Theory of Elementary Particles. Amsterdam: North-Holland, 1964
中译本: 基本粒子理论. 蔡建华, 龚昌德, 孙景李译, 上海: 上海科学技术出版社, 1966
72 M E Rose. Elementary Theory of Angular Momentum. New York: Wiley, 1957
中译本: 角动量理论. 万乙译, 上海: 上海科学技术出版社, 1963
73 A Salam. The Formalism of Lie Groups in Theoretical Physics. Director: A. Salam, International Atomic Energy Agency, Vienna, 1963, 173
中译本: 李群概论. 王佩译, 物理译丛, 核物理和理论物理, 1964, (12): 78

74 L I Schiff. Quantum Mechanics. Third Edition, New York: McGraw-Hill, 1968.
中译本: 量子力学. 李淑娴, 陈崇光译, 北京: 人民教育出版社, 1982
75 J P Serre. Lie Algebras and Lie Groups. New York: Benjamin, 1965
76 斯米尔诺夫. 高等数学教程 (第三卷第一分册). 北京大学数学力学系代数教研室译. 北京: 高等教育出版社, 1954
77 陶瑞宝. 物理学中的群论. 上海: 上海科学技术出版社, 1986
78 M Tinkham. Group Theory and Quantum Mechanics. New York: McGraw-Hill, 1964
79 Dian-Min Tong, Cheng-Jiu Zhu and Zhong-Qi Ma. Irreducible Representations of Braid Groups. J. Math. Phys., 1992, 33:2660
80 Dian-Min Tong, Shan-De Yang and Zhong-Qi Ma. A new class of representations of braid groups. Commun. Theor. Phys., 1996, 26:483
81 Wu-Ki Tung. Group Theory in Physics. Singapore: World Scientific, 1985
82 M Wadati and Y Akutsu. From solitons to knots and links. Progr. Theor. Phys. Supp., 1988, 94: 1
83 M Wadati, Y Yamada and T Deguchi. Knot theory and conformal field theory: reduction relations for braid generators. J. Phys. Soc. Jpn., 1989, 58: 1153
84 万哲先. 李代数. 北京: 科学出版社, 1964
85 王仁卉, 郭可信. 晶体学中的对称群. 北京: 科学出版社, 1990
86 H Weyl. The Theory of Groups and Quantum Mechanics, translated from German by H. P. Robertson. Dover Publications, 1931
87 H Weyl. The Classical Groups. Princeton: Princeton University Press, 1946
88 E P Wigner. Group Theory and its Applications to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra. New York: Academic Press, 1959
89 B G Wybourne. Classical Groups for Physicists. New York: Wiley, 1974
中译本: 典型群及其在物理学上的应用. 冯承天, 金元望, 张民生, 栾德怀译. 北京: 科学出版社, 1982
90 T Yamanouchi. On the construction of unitary irreducible representation of the symmetric group. Proc. Phys. Math. Soc. Japan, 1937, 19:436
91 严志达, 许以超. Lie 群及其 Lie 代数. 北京: 高等教育出版社, 1985
92 亚历山大洛夫等. 数学 —— 它的内容、方法和意义 (第三卷). 王元, 万哲先, 裘光明, 孙以丰, 田方增, 刘绍学, 吴品三, 王隽骧译. 北京: 科学出版社, 1984
93 C N Yang. Some exact results for the many-body problem in one dimension with repulsive delta-function interaction. Phys. Rev. Lett., 1967, 19:1312
94 余文海. 晶体结构的对称群. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 1991
95 W H Zachariasen. Theory of X Ray Diffraction in Crystals. New York: Wiley, 1951
96 Cheng-Jiu Zhu and Jin-Quan Chen. A new approach to permutation group representations II. J. Math. Phys., 1983, 24:2266
97 邹鹏程, 黄永畅. “不可约性假设”的证明及应用. 高能物理与核物理, 1995, 19: 796; 英文版: 1995, 19: 375
98 邹鹏程. 量子力学 (第二版). 北京: 高等教育出版社, 2003

人名对照表

中文	English
阿贝尔	Abel
埃伽	Eckart
巴克斯特	Baxter
贝塞尔	Bessel
布拉菲	Bravais
布拉格	Bragg
布里渊	Brillouin
布洛赫	Bloch
大久保	Okubo
达朗贝尔	d'Alembert
邓金	Dynkin
狄拉克	Dirac
范德蒙德	Vandermonde
范德瓦登	Van der Waerden
费德罗夫	Federov
费罗宾尼斯	Frobenius
福克	Fock
傅里叶	Fourier
伽罗华	Galois
盖尔范德	Gelfand
盖尔曼	Gell-Mann
盖拉赫	Gerlach
戈登	Gordan
格拉肖	Glashow
哈密顿	Hamilton
哈特里	Hartree
黑格斯	Higgs
黑克	Hecke
嘉当	Cartan
基林	Killing
卡西米尔	Casimir
克莱布施	Clebsch
克利福德	Clifford
克罗内克	Kronecker
库仑	Coulomb
库塔	Kutta

English	中文
Abel	阿贝尔
Baxter	巴克斯特
Bessel	贝塞尔
Bloch	布洛赫
Bragg	布拉格
Bravais	布拉菲
Brillouin	布里渊
Cartan	嘉当
Casimir	卡西米尔
Chevalley	谢瓦莱
Clebsch	克莱布施
Clifford	克利福德
Coulomb	库仑
d'Alembert	达朗贝尔
Dirac	狄拉克
Dynkin	邓金
Eckart	埃伽
Euclidean	欧几里得
Euler	欧拉
Federov	费德罗夫
Fock	福克
Fourier	傅里叶
Galois	伽罗华
Gelfand	盖尔范德
Gell-Mann	盖尔曼
Georgi	乔治
Gerlach	盖拉赫
Glashow	格拉肖
Gordan	戈登
Hamilton	哈密顿
Hartree	哈特里
Hecke	黑克
Higgs	黑格斯
Jacobi	雅可比
Jordan	若尔当
Killing	基林

拉卡	Racah	Kronecker	克罗内克
拉普拉斯	Laplace	Kutta	库塔
兰德	Landé	Landé	兰德
勒让德	Legendre	Laplace	拉普拉斯
李	Lie	Legendre	勒让德
理查森	Richardson	Lie	李
立特武德	Littlewood	Littlewood	立特武德
龙格	Runge	Lorentz	洛伦兹
洛伦兹	Lorentz	Minkowski	闵可夫斯基
闵可夫斯基	Minkowski	Moody	穆迪
诺贝尔	Nobel	Nishijima	西岛
欧几里得	Euclidean	Nobel	诺贝尔
欧拉	Euler	Okubo	大久保
泡利	Pauli	Pauli	泡利
乔治	Georgi	Racah	拉卡
若尔当	Jordan	Richardson	理查森
萨拉姆	Salam	Runge	龙格
塞尔	Serre	Salam	萨拉姆
舒尔	Schur	Schoenflies	熊夫利
塞曼	Zeeman	Schrödinger	薛定谔
斯特恩	Stern	Schur	舒尔
泰勒	Taylor	Schwinger	薛温格
外尔	Weyl	Serre	塞尔
维格纳	Wigner	Stern	斯特恩
西岛	Nishijima	Taylor	泰勒
谢瓦莱	Chevalley	Van der Waerden	范德瓦登
熊夫利	Schoenflies	Vandermonde	范德蒙德
薛定谔	Schrödinger	Weyl	外尔
薛温格	Schwinger	Wigner	维格纳
雅可比	Jacobi	Young	杨
杨	Young	Zeeman	塞曼

索　引

J

K